



# Modélisation cinétique et hydrodynamique pour la physique, la chimie et la santé, analyse mathématique et numérique

Laurent Boudin

## ► To cite this version:

Laurent Boudin. Modélisation cinétique et hydrodynamique pour la physique, la chimie et la santé, analyse mathématique et numérique. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2011. tel-00650560

**HAL Id: tel-00650560**

**<https://theses.hal.science/tel-00650560>**

Submitted on 12 Dec 2011

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE**

Laboratoire Jacques-Louis Lions

Équipe-projet Inria Reo

Mémoire de synthèse en vue d'obtenir une

Habilitation à diriger des recherches

Spécialité : Mathématiques

**Modélisation cinétique et hydrodynamique**

**pour la physique, la chimie et la santé,**

**analyse mathématique et numérique**

Laurent BOUDIN

soutenu le vendredi 9 décembre 2011 devant le jury composé de

Benoît DESJARDINS (Examineur)	- École Normale Supérieure
Laurent DESVILLETES (Examineur)	- École Normale Supérieure de Cachan
Vincent GIOVANGIGLI (Président)	- CNRS École Polytechnique
Edwige GODLEWSKI (Examinatrice)	- Université Pierre et Marie Curie
Peter A. MARKOWICH (Examineur)	- University of Cambridge & Universität Wien
Florian MÉHATS (Rapporteur)	- Université de Rennes 1

après rapports de

José Antonio CARRILLO	- Universitat Autònoma de Barcelona
Ansgar JÜNGEL	- Technische Universität Wien
Florian MÉHATS	- Université de Rennes 1



## Mille mercis

Je remercie d'abord sincèrement José Antonio Carrillo, Ansgar Jüngel et Florian Méhats d'avoir bien voulu écrire un rapport sur ce mémoire, malgré leurs très nombreuses obligations. Merci aussi à Benoît Desjardins, Laurent Desvilletes, Vincent Giovangigli, Edwige Godlewski, Peter Markowich et Florian Méhats d'avoir accepté de faire partie du jury.

Les travaux présentés dans ce mémoire doivent beaucoup à mes collaborateurs. Je ne peux que commencer par Laurent D., directeur de thèse exemplaire, puis collaborateur, toujours plein d'idées et de bonne humeur. Mes remerciements vont aussi à Céline B., Gérard, Adel, Benjamin, Bruno D., Patrice, Thomas, Bruno F., Dario, Thierry, Céline G., Michaël, Bérénice, Pierre-Emmanuel, Sidi-Mahmoud, Pauline, Frédéric, Emmanuel, Simona, Julien, Aurore, Benoît, Roberto, Renaud, Ayman, Francesco, Takéo, Marc, Laurent V., Lisl et Driss, avec qui j'ai eu le plaisir de travailler. Un grand merci aux relecteurs attentifs qu'ont été Alexandra et Frédéric.

Merci également à tous les membres du laboratoire Jacques-Louis Lions et de l'équipe Inria Reo (et plus généralement du bâtiment 16 à Rocquencourt), où l'atmosphère est si propice aux discussions, mathématiques ou non. C'est en bonne partie grâce à Yvon et Edwige, responsables éclairés et motivants, à Jean-Frédéric, et à tous ceux qui m'ont aidé quotidiennement dans les méandres administratifs ou informatiques : Danielle, Liliane, les inséparables, et Khashayar, Christian, Maryse, Corentin, Antoine, Michel, Salima et Florence. Ces remerciements vont tout autant aux équipes de soutien à l'enseignement à l'UPMC, en mathématiques et en informatique, et à l'EPU.

Je tiens à remercier tout particulièrement la joyeuse bande du « BurEx<sup>1</sup> » 2D24 (passée et actuelle, officielle et officieuse). Le lecteur pourra consulter [Seg11] pour en savoir (un peu) plus.

J'ai aussi eu le plaisir de travailler au ministère de la recherche avec une équipe aussi remarquable qu'efficace, autour d'Aline, et je peux aujourd'hui tous les remercier chaleureusement. Merci aussi à Michel, Laurent, Corinne, Marie-France, ainsi qu'à nos collègues des autres disciplines (notamment de l'informatique) : l'interaction aura été le maître-mot de notre passage rue Descartes.

Sans mes proches (certains déjà cités plus haut) et ma famille, la rédaction du présent mémoire (et tout ce qui l'a précédée) aurait été une tâche bien plus ardue à mener. Alors merci pour leur patience et leur soutien sans faille.

Enfin, si vous voyez que je vous ai oublié dans ces remerciements, je vous prie de me pardonner et de considérer que l'un des 630 mercis restant (si j'ai bien compté) vous revient de droit.

---

1. Non, ce n'est pas un label officiel.



# Table des matières

<b>Préambule</b>	<b>1</b>
<b>1 Modèles fluides</b>	<b>9</b>
1.1 Gaz sans pression . . . . .	9
1.1.1 Contexte . . . . .	9
1.1.2 Schéma numérique fluide pour les gaz sans pression . . . . .	11
1.2 Diffusion gazeuse . . . . .	15
1.2.1 Équations de Maxwell-Stefan . . . . .	15
1.2.2 Dérivation des équations à partir d'un modèle cinétique . . . . .	17
1.2.3 Modèles de diffusion dans le poumon . . . . .	20
1.2.4 Analyse mathématique et numérique des équations . . . . .	22
1.3 Modèle de production d'ozone . . . . .	24
1.3.1 Algorithmes parallèles . . . . .	25
1.3.2 Ozone . . . . .	26
<b>2 Modèles cinétiques</b>	<b>29</b>
2.1 Sociophysique . . . . .	29
2.1.1 Historique . . . . .	29
2.1.2 Tendance au consensus . . . . .	30
2.2 Consensus et réflexion personnelle . . . . .	31
2.2.1 Description et propriétés mathématiques du modèle . . . . .	31
2.2.2 Expériences numériques . . . . .	32
2.2.3 Limite d'opinion quasi-invariante . . . . .	33
2.3 Conciliants et contrariants . . . . .	35
2.3.1 Description . . . . .	35
2.3.2 Tests numériques . . . . .	36
2.4 Influence des médias, pluralisme politique . . . . .	38
2.4.1 Propriétés du modèle . . . . .	39
2.4.2 Expériences numériques . . . . .	40
<b>3 Modèles couplés fluide-cinétique</b>	<b>43</b>
3.1 Fluides compressibles . . . . .	44
3.1.1 Présentation du modèle . . . . .	44
3.1.2 Expériences numériques . . . . .	46
3.1.3 Fragmentation . . . . .	47
3.2 Aérosols dans le poumon . . . . .	51
3.2.1 Écoulement de l'air . . . . .	51

3.2.2	Modèle aérosol-air . . . . .	52
3.2.3	Discussion sur la rétroaction . . . . .	54
3.2.4	Comparaisons avec l'expérience . . . . .	55
3.2.5	Analyse mathématique . . . . .	57
<b>Publications de l'auteur</b>		<b>61</b>
<b>Bibliographie</b>		<b>63</b>

# Préambule

Dans ce mémoire, je présente la majeure partie de mes travaux de recherche, principalement autour de la **théorie cinétique** des gaz : on modélise un fluide, ou, plus généralement, un système constitué d'un grand nombre de particules (des molécules, par exemple), à l'aide d'une **fonction de distribution** définie sur l'espace des phases. Cet espace est constitué des variables macroscopiques usuelles, telles que le temps  $t \in \mathbb{R}_+$ , la position dans l'espace physique  $x \in \mathbb{R}^d$ ,  $d \geq 1$ , mais aussi de variables microscopiques décrivant l'état (dynamique, thermodynamique...) des particules : la vitesse  $v \in \mathbb{R}^d$ , le rayon  $r \in \mathbb{R}_+^*$ , l'énergie interne  $e_p \in \mathbb{R}_+$ , etc.

Le système de particules est observé pendant un laps de temps fini  $[0, T]$  ou infini  $[0, +\infty[$ , et évolue dans un domaine  $\Omega$ , borné ou non, de  $\mathbb{R}^d$ . La fonction de distribution  $f$  est alors typiquement une fonction positive définie sur  $[0, T] \times \Omega \times \mathbb{R}^d$ . À un temps donné  $t$ , la quantité  $f(t, x, v) dx dv$  représente la densité de particules autour du volume élémentaire centré en  $(x, v)$ . Le cadre fonctionnel naturel pour cette fonction de distribution est  $L^1$  : pour presque tout  $t$ , on aura  $f(t, \cdot) \in L_{\text{loc}}^1(\Omega; L^1(\mathbb{R}^d))$ , assurant ainsi qu'un domaine borné ne contient toujours qu'une quantité de matière finie.

Une équation cinétique permet de décrire le comportement d'un ensemble de particules soumises à l'action de forces extérieures (phénomène de traînée, champs électromagnétiques, par exemple), ou/et interagissant entre elles (collisions, fragmentation...). Elle s'écrit sous la forme :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \operatorname{div}_v(f a) = Q(f), \quad (1)$$

où  $a$  a la dimension d'une accélération et  $Q$  est un opérateur représentant les interactions entre particules et agissant souvent uniquement sur la variable  $v$ .

De manière naturelle, on peut adopter **deux points de vue**, éventuellement complémentaires. On peut d'abord **étudier directement l'équation cinétique** en jeu, et obtenir des propriétés sur  $f$ . Le second point de vue rejoint la **mécanique des fluides classique** : on peut dériver formellement des équations de type fluide en définissant les quantités macroscopiques **observables**, la densité  $\varrho$ , la vitesse  $u$  et la température  $T$ , à partir des moments de la fonction de distribution, pour tout  $t$  et  $x$  :

$$\varrho(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} f(t, x, v) dv, \quad \varrho(t, x)u(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} f(t, x, v) v dv,$$

$$\varrho(t, x)|u(t, x)|^2 + d\varrho(t, x)T(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} f(t, x, v) |v|^2 dv.$$



En intégrant (1) suivant  $v$ , on obtient l'équation de continuité (ou de conservation de la masse) :

$$\partial_t \varrho + \operatorname{div}_x(\varrho u) = \dots$$

En multipliant (1) par  $v$  et en intégrant suivant  $v$ , on obtient l'équation sur la quantité de mouvement macroscopique :

$$\partial_t(\varrho u) + \operatorname{div}_x(\varrho u \otimes u) = \dots$$

Enfin, en multipliant (1) par  $|v|^2$  et en intégrant de nouveau suivant  $v$ , on obtient une équation où apparaissent l'énergie cinétique macroscopique du système de particules, ainsi que sa température.

Néanmoins, l'usage des moments de  $f$  induit des problèmes de fermeture : les flux macroscopiques et les termes intégraux où apparaît  $Q(f)$  ne peuvent pas, en général, s'exprimer en fonction de ces moments (ce sont les termes avec les  $\dots$  dans les deux équations précédentes). Notons aussi que, numériquement, ce point de vue fluide a l'avantage d'être beaucoup moins coûteux que le cinétique.

Le lecteur est bien sûr invité à consulter les ouvrages ou chapitres d'ouvrage de référence sur le sujet, par exemple, Chapman et Cowling [CC90], Grad [Gra58], Cercignani, Illner et Pulvirenti [CIP94], Cercignani [Cer00], ou Villani [Vil02].

On peut utiliser simultanément les deux points de vue, en considérant deux phases distinctes, l'une dispersée, l'autre continue, évoluant ensemble. La première pourra donc être traitée par une équation cinétique, et la seconde par une équation de type fluide, Euler ou Navier-Stokes, par exemple. Le couplage de modèles est effectivement un sujet de recherche très actif, car il permet d'adapter la complexité des modèles étudiés à des situations de plus en plus proches de la réalité, restant malgré tout numériquement exploitables. On parle ici de **couplage fluide-cinétique** ou gaz-particules.

Le couplage entre les deux phases peut être faible (la phase dispersée subit l'action du porteur, mais pas l'inverse), ou fort (chacune des deux phases agit sur l'autre). Ce type de modèles a été introduit dans [Wil85, CP83]. On pourra se référer à l'article [Des10], où l'auteur présente les différents niveaux de modélisations pour les écoulements à deux phases (ou plus) : couplage d'équations fluides sur différents domaines séparés par une frontière libre constituée par l'ensemble des parois de gouttelettes, et les couplages fluide-cinétique et fluide-fluide sur un seul domaine.

Dans cet esprit, j'ai réparti mes travaux en trois sous-ensembles (fluide, cinétique, couplé), qui sont bien souvent non disjoints sur le fond et sur les applications. Dans ce mémoire, mes contributions sont citées sous la seule forme [Bn], où  $n \in \mathbb{N}^*$ . Elles vont de la **modélisation** au **calcul scientifique**, en passant par l'**analyse mathématique** et l'**analyse numérique**.

## Modèles hydrodynamiques

Le système des **gaz sans pression** est un exemple élémentaire de modèle fluide, que l'on peut obtenir à partir d'un modèle cinétique, et qui s'appuie sur la dynamique des particules collantes. Il s'écrit, en une dimension, comme les équations d'Euler où l'on a retiré le terme de pression, soit

$$\partial_t \varrho + \partial_x(\varrho u) = 0,$$

$$\partial_t \rho u + \partial_x (\rho u^2) = 0.$$

Au cours de ma thèse [B5], j'ai travaillé sur ce système [B4], et démontré la convergence des solutions visqueuses vers les solutions en dualité définies par Bouchut et James [BJ99].

J'ai récemment repris ces travaux pour obtenir, en collaboration avec Julien Mathiaud [B15], un **schéma numérique** disposant de toutes les propriétés requises (notamment la condition d'Oleinik) pour sélectionner une bonne approximation de la solution en dualité.

Les **mélanges gazeux à plusieurs composants** constituent un sujet de recherche très actuel, notamment pour ce qui concerne la pollution atmosphérique. Avec Bérénice Grec et Francesco Salvarani [B13], au sein de l'équipe-projet Inria Reo, nous avons dérivé les **équations de Maxwell-Stefan** comme limite hydrodynamique d'un modèle cinétique de mélange, faisant appel à plusieurs fonctions de distribution. Ce sont des équations de type diffusif introduites indépendamment à la fin du XIX<sup>e</sup> siècle par Maxwell [Max66] et Stefan [Ste71]. Elles sont amenées à **suppléer à la loi de Fick** lorsque les composants du mélange gazeux ont des propriétés de friction relative assez différentes.

Elles s'écrivent :

$$-\nabla_x \xi_i = \sum_{j \neq i} \frac{\xi_j N_i - \xi_i N_j}{D_{ij}},$$

où les  $\xi_i$  sont les fractions molaires de chaque espèce dans le mélange, les  $N_i$  sont les flux molaires normalisés correspondants, et les  $D_{ij}$ , appelés coefficients de diffusion binaires, permettent d'évaluer les propriétés de friction entre les molécules de deux espèces différentes.

Assez paradoxalement, à ma connaissance, il n'existe que très peu d'études mathématiques en liaison avec ces équations. Aussi, toujours avec Bérénice Grec et Francesco Salvarani [B12], nous avons obtenu des résultats d'existence et de convergence vers l'équilibre. Puis nous avons étudié un schéma numérique aux différences finies, pour mettre en valeur le phénomène de **diffusion remontante** en une dimension. En parallèle, dans [B14], avec Dario Götz et Bérénice Grec, nous avons proposé des études numériques comparatives entre la loi de Fick et les équations de Maxwell-Stefan, mettant en évidence le fait qu'un **mélange hélium-oxygène dans le poumon** a potentiellement un comportement assez différent de l'air.

Enfin, avec Adel Blouza et Sidi Mahmoud Kaber, dans [B3], nous avons travaillé sur un système de réactions chimiques, développé à l'IFP [ABBD94], impliquant la **production d'ozone** dans la troposphère. Notre contribution est principalement axée sur le calcul scientifique : les algorithmes de parallélisation en temps (« **pararéels** ») de résolution de systèmes différentiels. Nous nous sommes demandé si ces algorithmes pouvaient être couplés avec des méthodes de réduction de la taille du système différentiel, classiquement utilisées en cinétique chimique, comme la méthode des **états quasi-stationnaires**.

## Modèles cinétiques

Même s'il traite d'un modèle cinétique, je ne détaille pas dans ces pages l'article [B7] en collaboration avec Laurent Desvillettes sur la propagation des singularités pour

les solutions petites de l'équation de Boltzmann.

Je me concentre plutôt ici sur mes travaux les plus récents autour de la **socio-physique**, tous écrits en collaboration avec Francesco Salvarani, et d'autres auteurs, le cas échéant. Ils concernent la question de la **formation d'opinion** relativement à une **question binaire** (de type référendum), à l'aide des outils de la théorie cinétique. Cette approche paraît assez naturelle, car certains traits qualitatifs de la population (constituant alors notre système de particules) semblent ne pas dépendre des mécanismes microscopiques en jeu au sein de la population [Wei71, GGS82]. L'un d'entre eux est sans aucun doute la **tendance au consensus** : la discussion entre deux individus tend bien souvent à rapprocher leurs opinions respectives.

L'opinion  $x$  est l'une des deux variables, avec le temps, de la fonction de distribution  $f$ , et vit dans  $[-1, 1]$ . La tendance au consensus étant une caractéristique commune de tous les modèles présentés ici, on la prend en compte en incluant un opérateur de collision dans l'équation cinétique vérifiée par  $f$ . La quantité  $f(t, x) dx$  représente le nombre d'individus ou la fraction de population dont l'opinion est dans un intervalle de longueur  $dx$  centré en  $x$ , à l'instant  $t$ . Dans les travaux que je présente dans ce mémoire, le consensus est mis en balance avec divers phénomènes.

Dans [B18], Francesco Salvarani et moi-même nous intéressons à la compétition entre le consensus et la **réflexion personnelle** chez chaque individu. Comme le suggérait Ben-Naim [BN05], ce dernier phénomène est modélisé par un terme **diffusif**. Ainsi, on peut écrire l'équation cinétique dont  $f$  est solution :

$$\partial_t f = \partial_x (\alpha \partial_x f) + Q(f, f),$$

où  $\alpha$  est une fonction paire positive de  $x$ . Le terme  $Q(f, f)$  est un **opérateur de collision de type Boltzmann**, défini ici au sens faible :

$$\langle Q(f, f), \varphi \rangle = \beta \iint_{[-1, 1]^2} f(t, x) f(t, x_*) [\varphi(x') - \varphi(x)] dx_* dx,$$

où  $x'$  est donné par une règle de collision reflétant la tendance au consensus. Nous avons d'abord obtenu un résultat d'existence pour  $f$ , permettant de définir un cadre fonctionnel adapté à la situation. Puis nous avons exploré numériquement quelques situations pratiques, nous permettant de retrouver des conclusions obtenues dans [Gal97].

Nous avons ensuite étudié [B19] la **limite d'opinion quasi-invariante** pour le problème précédent. On suppose que les effets collisionnels et diffusifs sont petits, mais restent comparables. Le comportement de la limite quasi-invariante est alors plus simple à étudier. Lorsque diffusion et collisions sont du même ordre, et pour une fonction  $\alpha$  particulière, on obtient un **régime équilibre** pour lequel on peut prouver la convergence de la solution vers la solution stationnaire quand le paramètre de quasi-invariance tend vers 0.

Avec notre doctorante, Aurore Mercier, dans [B16], nous avons repris la notion d'agent **contrariant** au sein d'une population, introduite dans [Gal04, Gal07] pour expliquer certains phénomènes électoraux récents majeurs. Nous disposons de deux fonctions de distribution, l'une,  $f$ , représentant la population conciliante, l'autre,  $g$ , la contrariante. Les opérateurs de collision impliquant  $g$  sont non standards, tout comme

les règles de collision associées. Nous obtenons néanmoins un résultat d'existence pour  $f$  et  $g$  dans  $L_t^\infty(L^1(-1, 1))$  pour un système d'équations cinétiques avec collisions  $f/g$  et  $f/f$  pour  $f$ ,  $g/f$  et  $g/g$  pour  $g$ . Puis nous mettons en évidence l'absence possible d'équilibre en temps grand.

En compagnie de Roberto Monaco et de Francesco Salvarani, dans [B17], je me suis intéressé à l'influence des médias dans un système politique multipartite. L'originalité de ce travail concerne d'abord l'introduction d'un **vecteur d'opinion**, dont les composantes sont liées à chacun des partis, puis l'interaction avec les médias *via* des **opérateurs linéaires**. Nous obtenons un résultat d'existence par un argument de point fixe. Nous constatons aussi une forte **sensibilité** de la fonction de distribution par rapport aux variations d'opinion des médias, montrant ainsi leur **influence sur l'opinion moyenne**.

Pour terminer, avec Francesco Salvarani, nous avons écrit l'article de revue [B20] décrivant l'ensemble des contributions issues de la théorie cinétique pour la formation de l'opinion. Nous invitons le lecteur à le consulter pour plus de détails sur la question.

## Modèles couplés

Cette troisième classe de modèles permet d'utiliser les deux types de modèles précédents, en y ajoutant cependant les difficultés particulières liées au couplage.

On dispose d'une **classification** des *sprays* dans un mélange à deux phases, en fonction de trois paramètres : les collisions, la fraction volumique du *spray* et la rétroaction du *spray* sur le porteur *via* une force de traînée. La classification présentée dans le tableau 1 n'est pas forcément standard, mais s'adapte plutôt bien aux modèles que j'ai étudiés. Si les deux fluides ont des masses volumiques très différentes, il peut être pertinent d'utiliser les fractions massiques au lieu des fractions volumiques. Enfin, le modèle de *spray* n'est en principe plus adapté aux situations physiques envisagées, typiquement pour des fractions volumiques supérieures à 0,1.

<i>spray</i>	rétroaction	fraction volumique	collisions
très fin	négligeable	négligeable	négligeables
fin	non négligeable	négligeable	négligeables
mod. épais	non négligeable	négligeable	non négligeables
épais	non négligeable	non négligeable	non négligeables

Tableau 1 – Classification des *sprays*

Dans les différents travaux présentés dans ce mémoire, les applications où le porteur est compressible font appel à des *sprays* épais, éventuellement modérément, alors que dans le cadre du poumon, les aérosols sont plutôt des *sprays* fins, voire très fins. La question de la nature du *spray* est donc clairement centrale pour la modélisation.

## Fluide porteur compressible

Je ne parlerai pas, dans ce mémoire, du travail [B6] mené au Cemracs 2008 avec Benjamin Boutin, Bruno Fornet, Thierry Goudon, Pauline Lafitte, Frédéric Lagoutière

et Benoît Merlet. Il concerne une étude préliminaire d'un modèle à deux phases avec énergie pour lequel nous souhaitions écrire un **schéma préservant l'asymptotique**. Le travail s'est poursuivi avec succès dans le cadre du postdoc de Benjamin Boutin supervisé par Thierry Goudon et Pauline Lafitte. Néanmoins, le modèle fluide-cinétique qui y est présenté est très proche de celui sur lequel j'ai pu travailler au CEA.

En effet, lors de mon passage au centre CEA-DAM de Bruyères-le-Châtel, j'ai participé à l'**implémentation effective**, dans un code de production (Hésione), du modèle écrit avec Laurent Desvillettes et Renaud Motte pour tenir compte de la **compressibilité des gouttelettes** du *spray* dans le gaz ambiant, à partir du schéma décrit dans [Mot00] pour des particules incompressibles. La **modélisation** et les **expériences numériques** les plus parlantes figurent dans [B10]. Le principe du **schéma numérique** implémenté est présenté dans [B9] et largement détaillé dans [B5]. Le modèle, d'une grande complexité, vérifie les propriétés essentielles de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. Sa fiabilité numérique reste évidemment la question la plus pertinente pour le CEA. Les cas-tests académiques présentés dans les deux publications [B9, B10] donnent des résultats extrêmement satisfaisants sous la seule réserve de l'hypothèse de faible compressibilité des particules. Ce travail a ensuite été étendu dans le cadre d'un **contrat industriel avec le CEA-DAM**.

La partie cinétique de [B1], en collaboration avec Céline Baranger, Gérard Baudin, Bruno Després, Frédéric Lagoutière, Emmanuel Lapébie et Takéo Takahashi, apparaît plutôt comme un modèle faiblement couplé, car on se focalise sur l'équation cinétique et sur les termes qui y apparaissent, en rapport avec la **fragmentation**. L'originalité du modèle réside dans le fait qu'on génère par fragmentation des gouttelettes secondaires, tout en conservant la gouttelette mère. L'équation cinétique contient donc un terme de production concernant les gouttes filles et un terme de transport (dans la variable de rayon de l'espace des phases) pour les particules mères. Conformément aux observations expérimentales de la **DGA**, demandeuse de ce modèle, le *spray* initialement polydispersé devient rapidement monodispersé en taille, après le passage d'une onde de choc dans le porteur.

## Air incompressible dans le poumon

Au sein de l'équipe-projet Inria Reo, je me suis intéressé à la modélisation des **aérosols dans le poumon**. À ce titre, avec Céline Grandmont, nous avons participé informellement à l'encadrement de la thèse d'Ayman Moussa, tant du point de vue mathématique que numérique.

L'air est classiquement considéré comme un fluide newtonien visqueux incompressible dans le poumon, et son écoulement est piloté par les **équations de Navier-Stokes incompressibles** [Mau04, GMM05, BGM10]. L'aérosol est, quant à lui, gouverné par une équation de type **Vlasov**, de la forme (en omettant les constantes) :

$$\partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot ((u_g - v)f) = 0,$$

où  $u_g$  est la vitesse de l'air.

Dans [B2], avec Céline Baranger, Pierre-Emmanuel Jabin et Simona Mancini, nous avons utilisé l'article de Caflisch et Papanicolaou [CP83] pour discuter de l'**injection** et l'**inhalation** d'aérosols dans la gorge. La conclusion, logique, est que l'injection permet

un fort dépôt dans le fond de la gorge, tandis que l'inhalation permet le passage de davantage d'aérosol dans la trachée et le reste de l'arbre bronchique.

Au cours du postdoc de Lisl Weynans, qui a donné lieu à [B21], nous avons établi que les bonnes conditions aux limites pour l'équation cinétique étaient des **conditions d'absorption sur la paroi**. Le modèle complet est écrit ensuite pour la première fois dans la thèse d'Ayman Moussa [Mou09]. Avec Céline Grandmont, Bérénice Grec et Driss Yakoubi, nous l'avons repris dans [B11] pour évaluer le caractère négligeable ou non du terme de **rétroaction de l'aérosol** sur l'air dans les équations de Navier-Stokes. Nous avons ainsi constaté qu'en deux dimensions, la rétroaction pouvait avoir une incidence significative sur le **dépôt** de particules.

Dans le poster présenté par Ayman Moussa à l'ISAM'09, dont le résumé fait l'objet de la référence [B22], on établit une **comparaison entre des résultats expérimentaux et numériques** sur un circuit ventilatoire. Ceci concerne deux types de nébuliseurs (générateurs d'aérosols thérapeutiques) et trois débits d'air différents en ventilation mécanique. On s'intéresse en particulier aux zones de dépôt et à la quantité d'aérosol déposé. Ce travail a été l'objet d'une collaboration entre l'équipe Inserm U618 de Tours, et Reo. La partie numérique s'appuie sur les développements effectués par Ayman Moussa dans la librairie LifeV.

Enfin, dans [B8], avec Laurent Desvillettes, Céline Grandmont et Ayman Moussa, nous avons obtenu un résultat d'**existence pour le système fortement couplé Vlasov-Navier-Stokes**.



# Chapitre 1

## Modèles fluides

### Sommaire

<b>1.1 Gaz sans pression</b>	<b>9</b>
1.1.1 Contexte	9
1.1.2 Schéma numérique fluide pour les gaz sans pression	11
<b>1.2 Diffusion gazeuse</b>	<b>15</b>
1.2.1 Équations de Maxwell-Stefan	15
1.2.2 Dérivation des équations à partir d'un modèle cinétique	17
1.2.3 Modèles de diffusion dans le poumon	20
1.2.4 Analyse mathématique et numérique des équations	22
<b>1.3 Modèle de production d'ozone</b>	<b>24</b>
1.3.1 Algorithmes pararéels	25
1.3.2 Ozone	26

Je me suis principalement concentré sur les modèles de mélanges gazeux, avec application à la respiration et à l'atmosphère. C'est ce que je décris dans les deux dernières sections de ce chapitre. Néanmoins, j'ai aussi travaillé sur le modèle original des gaz sans pression, plutôt issu de la physique des plasmas.

### 1.1 Gaz sans pression

#### 1.1.1 Contexte

Le système des gaz sans pression a été formellement introduit pour la première fois par Bouchut [Bou94]. Pour un temps  $T > 0$  donné, il s'écrit, en une dimension d'espace, comme

$$\partial_t \varrho + \partial_x(\varrho u) = 0, \quad (1.1)$$

$$\partial_t q + \partial_x(qu) = 0, \quad (1.2)$$

dans  $]0, T[ \times \mathbb{R}$ , où  $\varrho(t, x) \geq 0$  désigne la densité du gaz et  $q(t, x) \in \mathbb{R}$  sa quantité de mouvement. La vitesse  $u(t, x) \in \mathbb{R}$  est naturellement définie comme le quotient de  $q$  par  $\varrho$ , mais cela pose problème lorsque  $\varrho = 0$ . Pour lever cette difficulté, Bouchut et



James [BJ98, BJ99] ont fait appel à la notion de solution en dualité. On adjoint des conditions initiales à (1.1)–(1.2) :

$$\varrho(0, \cdot) = \varrho^{\text{in}}, \quad q(0, \cdot) = q^{\text{in}}, \quad (1.3)$$

où la condition sur la quantité de mouvement peut être remplacée par une condition initiale pour la vitesse  $u(0, \cdot) = u^{\text{in}}$ , ensuite écrite  $q(0, \cdot) = \varrho^{\text{in}} u^{\text{in}}$ .

Les gaz sans pression peuvent clairement être vus comme un modèle limite des équations d'Euler à pression évanescence. À l'aide de la théorie cinétique, on peut constater que ce système permet la description des plasmas froids : en effet, au moins d'un point de vue formel, si  $f := f(t, x, v)$  est solution d'une équation de Boltzmann

$$\partial_t f + v \partial_x f = Q(f, f),$$

$Q(f, f)$  étant un opérateur de collision quadratique agissant uniquement sur la variable de vitesse  $v$ , et si la donnée initiale tend vers une maxwellienne de température nulle, alors les moments d'ordre 0 et 1 de  $f$ ,

$$\varrho(t, x) = \int_{\mathbb{R}} f(t, x, v) dv \quad \text{et} \quad q(t, x) = \int_{\mathbb{R}} f(t, x, v) v dv,$$

sont asymptotiquement solutions de (1.1)–(1.2). Le modèle peut aussi être obtenu par une approche discrète en considérant un ensemble de particules dites « collantes » : deux particules se collent l'une à l'autre en se croisant, tout en conservant la masse et la quantité de mouvement totales, voir [Gre95, ERS96, BG98]. Cette dynamique est l'objet d'un modèle simplifié de mouvement des galaxies [Zel70]. On citera aussi le travail de Poupaud [Pou02], qui peut être vu comme une généralisation des gaz sans pression en plusieurs dimensions.

Lorsque l'on cherche des solutions régulières, on peut clairement remplacer (1.2) par l'équation de Burgers :

$$\partial_t u + \partial_x \left( \frac{u^2}{2} \right) = 0. \quad (1.4)$$

Le système (1.1)–(1.2) est alors découplé, puisque  $u$  est obtenu grâce à (1.4), puis  $\varrho$  par (1.1). Néanmoins, on sait bien que même des données initiales régulières peuvent engendrer un phénomène de concentration de masse, par exemple quand la vitesse ne peut pas croître. Dans ce cas, la vitesse n'est plus solution de l'équation de Burgers (1.4), et l'on doit alors travailler avec des solutions mesures, voir [PR97].

Dans [BJ98], Bouchut et James ont introduit la notion de solution en dualité pour l'équation de transport et les lois de conservation scalaires. Puis, dans [BJ99], ils ont prouvé que ce cadre convenait aux gaz sans pression, notamment par l'adjonction aux conditions entropiques naturelles d'une estimation par le haut de  $\partial_x u$ . Ils parviennent ainsi à donner un sens à  $u$   $\varrho$ -presque partout,  $\varrho$  étant une solution mesure, et à construire une solution en dualité des gaz sans pression, où  $u$  est  $L^\infty$  et vérifie la condition d'Oleinik  $\partial_x u(t, x) \leq 1/t$  pour presque tout  $t$  et  $x$ . Lorsque les solutions sont régulières, cette estimation est connue, puisque l'équation de Burgers (1.4) est une loi de conservation scalaire convexe [Hof83, BO88, LeV92].

Dans l'article [B4] et le chapitre (plus détaillé) de ma thèse [B5], j'ai prouvé que le système des gaz sans pression peut être obtenu comme limite du système correspondant avec viscosité : la densité du gaz  $\varrho(t, x) > 0$  et sa vitesse  $u(t, x) \in \mathbb{R}$  vérifient,

dans  $]0, T[ \times \mathbb{R}$ , les équations (1.1) et

$$\partial_t u + \partial_x \left( \frac{u^2}{2} \right) = \frac{\varepsilon}{\varrho} \partial_{xx}^2 u, \quad (1.5)$$

où  $\varepsilon > 0$  est fixé. Les conditions initiales (1.3) restent bien sûr identiques. Le problème mis sous cette forme exige clairement que  $\varrho$  reste strictement positif pour que tout ait un sens, ce qui est le cas si  $\varrho^{\text{in}} > 0$ . L'équation précédente s'écrit aussi de façon immédiate

$$\partial_t(\varrho u) + \partial_x(\varrho u^2) = \varepsilon \partial_{xx}^2 u,$$

ce qui nous permet de retrouver (1.2) quand  $\varepsilon$  tend vers 0.

J'ai donc d'abord obtenu l'existence, au sens des distributions, de solutions au système visqueux formé des équations (1.1), (1.3) et (1.5), ainsi que la borne sur le taux d'accroissement :  $\partial_x u \leq A/(At + 1)$ , quand  $A = \max(\text{ess sup } \partial_x u^{\text{in}}, 0)$  est fini. Puis j'ai prouvé la convergence des solutions de viscosité vers les solutions en dualité du système des gaz sans pression lorsque  $\varepsilon$  tend vers 0. Plus précisément, j'ai établi le résultat de convergence suivant.

**Théorème 1.1.** *On considère des données initiales  $(\varrho^{\text{in}}, (u^{\text{in}}))$  telles que, pour tout  $\varepsilon > 0$ ,*

$$\varrho_\varepsilon^{\text{in}} > 0, \quad \varrho_\varepsilon^{\text{in}} \in L^\infty(\mathbb{R}), \quad \|1/\varrho_\varepsilon^{\text{in}}\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq C\varepsilon^{-1/4},$$

$$u_\varepsilon^{\text{in}} \in L^1 \cap L^\infty(\mathbb{R}), \quad \|u_\varepsilon^{\text{in}}\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq C,$$

$$\partial_x u_\varepsilon^{\text{in}} \in L^1 \cap L^2(\mathbb{R}), \quad \text{ess sup } \partial_x u_\varepsilon^{\text{in}} \leq C\varepsilon^{-1/2}.$$

*Si  $(\varrho_\varepsilon^{\text{in}}) \rightharpoonup \varrho^{\text{in}}$  et  $(\varrho_\varepsilon^{\text{in}} u_\varepsilon^{\text{in}}) \rightharpoonup q^{\text{in}}$  dans  $w^*\text{-}\mathcal{M}_{\text{loc}}(\mathbb{R})$ , alors, à extraction près, la suite des solutions  $(\varrho_\varepsilon, \varrho_\varepsilon u_\varepsilon)$  de (1.1) et (1.5), de données initiales  $(\varrho_\varepsilon^{\text{in}}, \varrho_\varepsilon^{\text{in}} u_\varepsilon^{\text{in}})$ , converge dans  $C_t(w^*\text{-}\mathcal{M}_{\text{loc}}(\mathbb{R}))$  vers la solution en dualité  $(\varrho, q)$  de (1.1)–(1.3).*

Les systèmes des gaz sans pression visqueux et non visqueux peuvent aussi être étudiés dans un cadre périodique. On travaille alors sur le segment  $[0, 1]$  et on impose des conditions aux limites périodiques, de sorte que les quantités physiques qu'on étudie ont la même valeur en  $x = 0$  et  $x = 1$ , et sont 1-périodiques.

### 1.1.2 Schéma numérique fluide pour les gaz sans pression

Ce travail fait l'objet de l'article [B15] en collaboration avec Julien Mathiaud. On s'intéresse à la discrétisation de (1.1)–(1.2). Il y a *a priori* deux points de vue pour obtenir des schémas adaptés. Le premier est d'utiliser le cadre cinétique sous-jacent en faisant appel à des schémas cinétiques, comme dans [Bou94, BJL03], ou particuliers [CKR07]. Le second est lié à la discrétisation des lois de conservation hyperboliques. Gosse et James [GJ00] ont mis en évidence la pertinence de deux familles de schémas numériques : les schémas décentrés amont et les schémas de Lax-Friedrichs.

Comme nous l'avons déjà souligné, la condition *sine qua non* pour obtenir la solution en dualité est la condition d'Oleinik. L'avantage des schémas s'appuyant sur la théorie cinétique est que cette condition apparaît naturellement. Nous avons choisi le point de vue fluide pour construire un schéma vérifiant la condition d'Oleinik discrétisée, dont Brenier et Osher [BO88] ont montré la pertinence dans le cas des lois de conservation scalaires convexes.

Dans le reste de cette partie 1.1.2, on considère  $\Delta t, \Delta x > 0$  tels que  $N = T/\Delta t \in \mathbb{N}^*$  et  $I = 1/\Delta x \in \mathbb{N}^*$ , et on pose  $\lambda = \Delta t/\Delta x$ . On note respectivement  $\varrho_i^n, q_i^n$  et  $u_i^n$  les valeurs approchées de  $\varrho, q$  et  $u$  à l'instant  $n\Delta t \in [0, T]$  et à l'abscisse  $(i + 1/2)\Delta x \in [0, 1[$ , pour  $0 \leq n \leq N$  et  $0 \leq i < I$ . Puisque l'on travaille en périodique, on définit  $\varrho_i^n, q_i^n$  et  $u_i^n$  pour tout  $i \in \mathbb{Z}$ , par

$$\varrho_{i+pI}^n = \varrho_i^n, \quad q_{i+pI}^n = q_i^n, \quad u_{i+pI}^n = u_i^n, \quad 0 \leq i < I, \quad p \in \mathbb{Z}^*.$$

Dans un souci de lisibilité, on peut être amené à « oublier » l'indice  $n$  et remplacer l'indice  $n + 1$  par le symbole prime « ' ». Hormis la densité, la quantité de mouvement et la vitesse, on calcule aussi ce que l'on a appelé le taux d'accroissement numérique, défini, pour tout  $n$  et  $i$ , par  $w_i^n = n\lambda(u_{i+1}^n - u_i^n)$ . La condition d'Oleinik à l'instant  $n\Delta t$  s'écrit alors  $\max_i w_i^n \leq 1$ .

### Le schéma décentré amont

Nous avons d'abord tenté d'utiliser un schéma décentré amont associé à (1.1)–(1.2). Nous ne nous sommes pas intéressés au schéma de Lax-Friedrichs également préconisé dans [GJ00], car trop dissipatif. Écrivons le schéma pour des données initiales positives, sachant qu'il est monotone sous la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)  $\lambda \max |u| \leq 1$ . On a, pour tout  $0 \leq i < I$ ,

$$\begin{aligned} \varrho_i' &= (1 - \lambda u_i) \varrho_i + \lambda u_{i-1} \varrho_{i-1}, \\ q_i' &= (1 - \lambda u_i) q_i + \lambda u_{i-1} q_{i-1}, \\ u_i' &= \frac{q_i'}{\varrho_i'}, \end{aligned}$$

où  $u_i'$  n'est défini que si  $\varrho_i' > 0$ , ce qui est conforme au fait que  $u$  n'est défini que  $\varrho$ -presque partout. Du point de vue numérique, on peut imposer n'importe quelle valeur à  $u$  lorsque la densité est nulle, par exemple, 0. Cela n'aura pas d'impact, en principe, puisqu'il n'y a pas de matière à transporter au point correspondant.

Malheureusement, même en ne tenant pas compte de ces valeurs arbitraires de la vitesse, on peut trouver des cas où le schéma ne peut vérifier la condition d'Oleinik.

**Proposition 1.2.** *Soient  $\lambda \in ]0, 1[$ ,  $U \in ]0, 1/\lambda[$ , et un entier  $I > 2 + 1/\lambda$ . Pour les données initiales suivantes :*

$$\varrho^{\text{in}} \equiv 1, \quad u^{\text{in}} \equiv 0, \quad \text{sauf en } 0 \text{ où } u^{\text{in}}(0) = U, \quad (1.6)$$

*le schéma décentré amont ne vérifie pas la condition d'Oleinik. Plus précisément, on a*

$$\max_i w_i^{I-2} > U.$$

La proposition 1.2 signifie en particulier que, pour un  $\Delta x$  assez petit, la condition d'Oleinik ne peut plus être vérifiée partout, pour les données initiales (1.6). De plus, comme  $I$  ne dépend pas du temps final  $T$ , on peut toujours trouver une discrétisation pour laquelle le schéma décentré amont ne peut pas vérifier la condition d'Oleinik. Pour donner une idée de la démonstration, le problème surgit au moment où la matière partie de  $x = 0$  au temps initial arrive au voisinage de  $x = 1$  : ceci provoque un saut de vitesse qui rend impossible l'estimation sur le taux d'accroissement de la vitesse.

On notera au passage que, même si on choisit des données initiales périodiques régulières, le schéma décentré amont ne fournit pas nécessairement une solution vérifiant la condition d'Oleinik, voir la courbe continue pointée (en bleu) sur la figure 1.1.

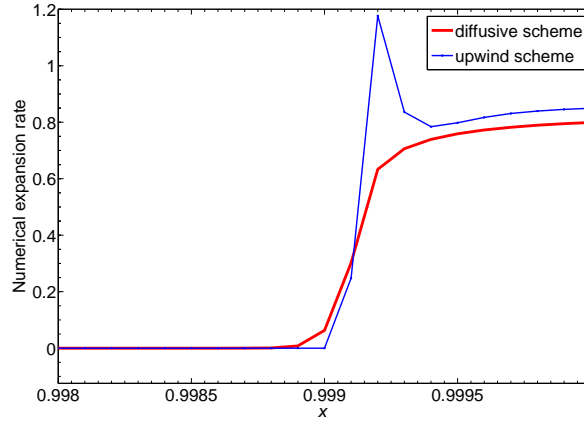


FIGURE 1.1 – Taux d'accroissement numérique près de  $x = 1$  après un cycle

### Le schéma diffusif

Essayons maintenant un schéma diffusif naturellement associé à (1.1) et (1.5), et expliquons la stratégie, basée sur [B4], pour obtenir une bonne approximation numérique de la solution en dualité au système des gaz sans pression non visqueux. Les données initiales doivent d'abord être préparées.

On considère  $\varepsilon > 0$  fixé. Si nécessaire, on régularise  $u^{\text{in}}$  et  $\varrho^{\text{in}}$ , de sorte que  $u^{\text{in}}, \varrho^{\text{in}} \in C^1(\mathbb{R}; \mathbb{R}_+^*)$ , peuvent dépendre de  $\varepsilon$ , restent périodiques, et vérifient les hypothèses du théorème 1.1, soit

$$\varrho^{\text{in}}(x) \geq C\varepsilon^{1/4}, \quad u^{\text{in}}(x) \leq C, \quad (u^{\text{in}})'(x) \leq \frac{C}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad \forall x \in [0, 1], \quad (1.7)$$

où  $C > 0$  est une constante ne dépendant pas de  $\varepsilon$ .

On pose dorénavant

$$\begin{aligned} U &= \max_{[0,1]} u^{\text{in}} > 0, & V &= \min_{[0,1]} u^{\text{in}} > 0, \\ A &= \max(0, \max_{[0,1]} (u^{\text{in}})') \geq 0, & R &= \min_{[0,1]} \varrho^{\text{in}} > 0. \end{aligned}$$

Ces quantités peuvent dépendre de  $\varepsilon$ , et on impose les conditions découlant de (1.7), c'est-à-dire

$$R \geq C\varepsilon^{1/4}, \quad V \leq U \leq C, \quad A \leq \frac{C}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad (1.8)$$

où  $C > 0$  ne dépend pas de  $\varepsilon$ . Puis on choisit  $\Delta t, \Delta x > 0$  tels que

$$0 < \Delta x \leq \frac{2V}{1+A}, \quad (1.9)$$

$$0 < \Delta t \leq \min \left( \frac{1}{4A+1}, \frac{1}{4U} \Delta x, \frac{R}{4\varepsilon(1+AT)} \Delta x^2 \right). \quad (1.10)$$

Les deux conditions précédentes ne sont pas si restrictives, puisqu'en fait,  $\Delta x$  est au pire de l'ordre de  $\sqrt{\varepsilon}$  et  $\Delta t$  de l'ordre de  $\sqrt[4]{\varepsilon}$ , ce qui n'est pas surprenant pour un schéma diffusif. On écrit enfin la discrétisation de (1.1) et (1.5), soit

$$u'_i = u_i - \lambda \left( \frac{u_i^2}{2} - \frac{u_{i-1}^2}{2} \right) + \frac{\varepsilon \sigma}{\varrho_i} (u_{i-1} + u_{i+1} - 2u_i), \quad (1.11)$$

$$\varrho'_i = (1 - \lambda u'_i) \varrho_i + \lambda u'_{i-1} \varrho_{i-1}, \quad (1.12)$$

avec  $\lambda = \Delta t / \Delta x$  et  $\sigma = \Delta t / \Delta x^2$ . Les termes de vitesse apparaissant dans (1.12) sont pris au temps  $(n+1)\Delta t$ , cela est nécessaire pour obtenir la minoration de  $\varrho$  par une quantité strictement positive à chaque pas de temps.

On constate d'ores et déjà sur la courbe continue (rouge) de la figure 1.1 que le schéma permet de corriger le problème lié au taux d'accroissement numérique. Plus précisément, on a en fait le

**Théorème 1.3.** *Sous les hypothèses (1.9)–(1.10), on a, pour tout  $i$  et  $n \geq 0$ ,*

$$\begin{aligned} V &\leq u_i^n \leq U, \\ u_i^n - u_{i-1}^n &\leq \frac{A\Delta x}{1 + An\Delta t}, \\ \varrho_i^n &\geq \frac{R}{1 + An\Delta t} \geq \frac{R}{1 + AT} > 0. \end{aligned}$$

*De plus, la masse totale discrète est conservée au cours du temps. Enfin, à  $\varepsilon > 0$  fixé, le schéma (1.11)–(1.12) est consistant avec (1.1) et (1.5), est d'ordre 1 en temps et en espace, et est monotone.*

Le principal argument de la démonstration réside dans l'utilisation de combinaisons convexes bien choisies.

Notre stratégie fonctionne pour deux raisons. Nous avons prouvé que le schéma (1.11)–(1.12) était stable  $L^\infty$ , consistant, monotone, et qu'il vérifiait la condition d'Oleinik. Ainsi,  $(\varrho_i^n)$  et  $(u_i^n)$  convergent vers  $\varrho$  et  $u$ , solutions des gaz sans pression avec viscosité quand  $\Delta t$  et  $\Delta x$  tendent vers 0, à  $\varepsilon$  fixé. Puis, grâce au théorème 1.1, on sait que le schéma fournit une bonne approximation de la solution des gaz sans pression, si  $\varepsilon$  est assez petit, et si les données initiales régularisées sont suffisamment proches des données de départ et vérifient (1.7). L'étude précise de l'erreur commise entre ces solutions numériques et les solutions en dualité est en cours, toujours en collaboration avec Julien Mathiaud.

Le principal défaut de ce schéma diffusif réside dans le fait qu'il ne conserve pas exactement la quantité de mouvement totale. Néanmoins, dans les cas auxquels nous nous sommes intéressés, les variations de quantité de mouvement restent minimales. Prenons par exemple les données initiales suivantes, avant régularisation :

$$\varrho^{\text{in}}(x) = 1, \quad u^{\text{in}}(x) = 1 - x \geq 0, \quad \forall x \in [0, 1[, \quad (1.13)$$

prolongées sur  $\mathbb{R}$  par 1-périodicité. On choisit  $\Delta x = 10^{-4}$ ,  $\varepsilon = 10^{-3}$  et  $T = 1,2$ . La masse et la quantité de mouvement totales sont tracées dans la figure 1.2.

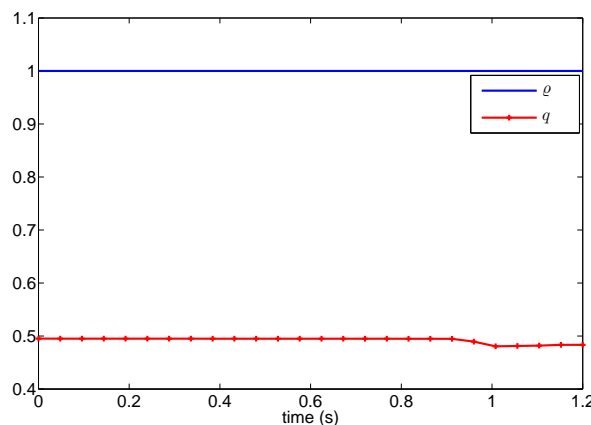


FIGURE 1.2 – Masse et quantité de mouvement totales

## 1.2 Diffusion gazeuse

Cette partie est dédiée à mes travaux sur les équations de Maxwell-Stefan pour la diffusion dans des mélanges à plusieurs espèces. La diffusion est un processus dépendant du temps, prenant sa source dans le mouvement auto-généré de particules données dans l'espace. Traditionnellement, la diffusion est décrite par la loi de Fick [Fic55a, Fic55b]. Son postulat est qu'une espèce donnée va se déplacer d'une région à forte concentration vers une région à concentration plus faible, et que le flux est proportionnel au gradient de la concentration. On pourra consulter le livre de Crank [Cra75] pour une vue générale, à la fois physique et mathématique, sur la diffusion fickienne.

Cette relation de proportionnalité entre le flux et le gradient de concentration fournit une bonne approximation du processus de diffusion dans la plupart des cas. Néanmoins, dans certaines situations, la loi de Fick n'est plus suffisante.

La diffusion dans des mélanges gazeux à plusieurs espèces a été décrite avec précision pour la première fois dans des travaux indépendants de Maxwell [Max66] et de Stefan [Ste71]. Ils expliquent que la diffusion est due aux interactions binaires entre molécules du mélange gazeux, ce qui mène à un système d'équations aux dérivées partielles couplées et non linéaires. La diffusion apparaît alors comme bien plus complexe que prévue par la loi de Fick.

Dans cette partie, je présente d'abord les équations de Maxwell-Stefan. Je détaille ensuite la publication [B13] en obtenant formellement ces équations comme limite hydrodynamique d'un modèle cinétique de mélange. Puis je parle du travail [B14] entamé au Cemracs 2009, où l'on a effectué quelques comparaisons sur les modèles de diffusion de type Fick et Maxwell-Stefan. Enfin, je reviens sur quelques propriétés des équations de Maxwell-Stefan, objet de l'article [B12]. Le premier et le troisième articles sont le fruit d'une collaboration avec Bérénice Grec et Francesco Salvarani, et le *proceeding* du Cemracs a été écrit avec Dario Götz et Bérénice Grec.

### 1.2.1 Équations de Maxwell-Stefan

On considère un domaine  $\Omega$  de  $\mathbb{R}^d$ ,  $d \geq 2$ , de frontière régulière, et on s'intéresse à un mélange de gaz parfaits constitué de  $I \geq 2$  espèces, vivant dans  $\Omega$ . Pour chaque

espèce du mélange  $\mathcal{A}_i$ ,  $1 \leq i \leq I$ , on définit sa fonction de densité de nombre  $n_i$ , ainsi que sa concentration  $c_i$  et sa fraction molaire  $\xi_i$ . Ces trois quantités dépendent uniquement du temps  $t$  et de la position  $x \in \Omega$ . La concentration et la fonction de densité sont en fait proportionnelles *via* le nombre d'Avogadro  $\mathcal{N}_A \simeq 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  :  $n_i = \mathcal{N}_A c_i$ . De plus, si on note  $c_{\text{tot}}$  la concentration du mélange, c'est-à-dire

$$c_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^I c_i,$$

la fraction volumique est donnée par

$$\xi_i = \frac{c_i}{c_{\text{tot}}}.$$

Pour fixer les idées, et par souci de simplicité, on se place en régime purement diffusif dans un domaine compact, sans aucune entrée ou sortie de matière. En particulier, s'il y a le même nombre de molécules en tout point, au temps initial, ce nombre reste indépendant à la fois de  $t$  et de  $x$ . Cela implique que la concentration totale du mélange  $c_{\text{tot}}$  reste constante. Ainsi, pour chaque espèce  $\mathcal{A}_i$ , les quantités  $n_i$ ,  $c_i$  et  $\xi_i$  sont proportionnelles.

Aussi nous ne nous intéressons qu'aux fractions molaires. On peut alors définir le flux (diffusif) molaire normalisé  $N_i$  de l'espèce  $\mathcal{A}_i$ , intervenant dans la conservation de la masse de l'espèce  $\mathcal{A}_i$  :

$$\partial_t \xi_i + \nabla_x \cdot N_i = 0. \quad (1.14)$$

Ainsi, pour tout  $i$ , la loi de Maxwell-Stefan, permettant d'exprimer les flux en fonction des fractions molaires et de leur gradient, s'écrit :

$$-\nabla_x \xi_i = \sum_{j \neq i} \frac{\xi_j N_i - \xi_i N_j}{D_{ij}}, \quad (1.15)$$

où les  $D_{ij}$  sont appelés les coefficients de diffusion binaires.

En sommant (1.15) sur tous les  $i$ , on observe que les lois de Maxwell-Stefan sont linéairement dépendantes : nous avons donc besoin d'une dernière équation. La relation de fermeture naturelle est

$$\sum_{i=1}^I N_i = 0,$$

puisque l'on s'est placé en régime purement diffusif. Maintenant, en sommant (1.14) sur tous les  $i$ , on constate que la somme des fractions molaires reste bien constante au cours du temps et en fonction de la position, ce qui est consistant avec la relation, nécessairement vérifiée par définition des fractions molaires :

$$\sum_{i=1}^I \xi_i = 1.$$

Cette vision des équations de Maxwell-Stefan sort un peu de l'ordinaire, car en principe, elles sont écrites avec les concentrations, voir [Wil85]. Mais l'hypothèse sur le régime purement diffusif permet cette simplification, et facilite la dérivation à partir du modèle cinétique.

On peut renvoyer à l'article de revue physique sur ces équations [KW97].

### 1.2.2 Dérivation des équations à partir d'un modèle cinétique

L'obtention de modèles fluides à partir de la théorie cinétique constitue un champ de recherche très actif, qui remonte à Hilbert lors de son exposé [Hil02] au Congrès mondial des mathématiciens, à Paris, en 1900. Ce « sixième problème de Hilbert » a été formulé rigoureusement dans des travaux de Bardos, Golse et Levermore [BGL89, BGL91, BGL93], qui ont ensuite mené à des articles comme [GSR04], où Golse et Saint-Raymond ont étudié la limite Navier-Stokes pour l'équation de Boltzmann dans  $\mathbb{R}^3$ .

Dans ces articles, on étudie un gaz parfait seul, monoatomique. Bien entendu, les situations physiques réalistes sont plus compliquées : mélanges à plusieurs espèces, réactions chimiques... L'analyse mathématique des équations de type Boltzmann décrivant l'évolution du mélange apparaît beaucoup plus complexe, à cause de la présence d'opérateurs de collision bi-espèces et de l'influence des densités de chaque espèce sur les autres. Nous sommes d'ailleurs en train de travailler sur cette question, avec Bérénice Grec et Francesco Salvarani, dans le cadre de la thèse de Milana Pavić. Néanmoins, la dérivation, même formelle, d'équations macroscopiques à partir de modèles cinétiques reste cruciale pour de nombreuses raisons : domaine de validité du modèle, développement de schémas numériques préservant l'asymptotique, *etc.*

L'article [B13] propose une généralisation du modèle cinétique pour les mélanges gazeux de Sirovich [Sir62], et peut aussi être vu comme une version complètement élastique et sans réaction chimique du modèle de Desvillettes, Monaco et Salvarani [DMS05].

#### Le modèle cinétique

Pour chaque espèce  $\mathcal{A}_i$  du mélange gazeux, on introduit une fonction de densité de nombre normalisée  $f_i$ , dépendant du temps  $t$ , de la position  $x \in \mathbb{R}^d$  et de la vitesse  $v \in \mathbb{R}^d$ . Pour chaque  $i$ , la quantité  $f_i(t, x, v) dx dv$  représente le nombre de molécules de l'espèce  $\mathcal{A}_i$  à l'instant  $t$  dans le volume élémentaire de l'espace des phases de mesure  $dx dv$ , centré en  $(x, v)$ , rapporté au nombre total de molécules, supposé constant et uniforme. La fraction molaire  $\xi_i$  est alors clairement reliée à  $f_i$  par la relation

$$\xi_i(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} f_i(t, x, v) dv.$$

À l'intérieur du mélange ont lieu des collisions mécaniques entre les molécules de chaque espèce. Plus précisément, on considère deux molécules de l'espèce  $\mathcal{A}_i$  et  $\mathcal{A}_j$ ,  $1 \leq i, j \leq I$ , de masse respective  $m_i$  et  $m_j$ , et de vitesse pré-collisionnelle respective  $v'$ ,  $v'_*$ . Après collision, les molécules n'ont pas changé d'espèce, donc elles ont la même masse qu'avant collision, mais leurs vitesses ont changé, maintenant notées  $v$  et  $v_*$ . Les collisions sont supposées élastiques : la quantité de mouvement et l'énergie cinétique sont conservées au cours de la collision, soit les relations

$$m_i v' + m_j v'_* = m_i v + m_j v_*, \quad \frac{1}{2} m_i |v'|^2 + \frac{1}{2} m_j |v'_*|^2 = \frac{1}{2} m_i |v|^2 + \frac{1}{2} m_j |v_*|^2. \quad (1.16)$$

À cause de (1.16), on peut écrire  $v'$  et  $v'_*$  en fonction de  $v$  et  $v_*$  :

$$v' = \frac{1}{m_i + m_j} (m_i v + m_j v_* + m_j |v - v_*| \omega), \quad (1.17)$$



$$v'_* = \frac{1}{m_i + m_j} (m_i v + m_j v_* - m_i |v - v_*| \omega), \quad (1.18)$$

où  $\omega$  est un élément arbitraire de la sphère unité  $S^{d-1}$  de  $\mathbb{R}^d$ , tenant compte du fait que (1.16) permet  $d - 1$  degrés de liberté.

On est alors en mesure d'introduire les opérateurs de collision.

1. L'opérateur de collision mono-espèce associé à  $\mathcal{A}_i$  est défini par

$$Q_i^m(f, f)(v) = \iint_{\mathbb{R}^d \times S^{d-1}} B_i(v, v_*, \omega) [f(v')f(v'_*) - f(v)f(v_*)] d\omega dv_*,$$

où  $v', v'_*$  sont donnés par (1.17)–(1.18), et la section efficace  $B_i$  vérifie les hypothèses de micro-réversibilité.

2. L'opérateur de collision bi-espèce associé à  $\mathcal{A}_i$  et  $\mathcal{A}_j$ ,  $i \neq j$ , est défini par

$$Q_{ij}^b(f, g)(v) = \iint_{\mathbb{R}^d \times S^{d-1}} B_{ij}(v, v_*, \omega) [f(v')g(v'_*) - f(v)g(v_*)] d\omega dv_*,$$

où  $v', v'_*$  sont encore donnés par (1.17)–(1.18), et la section efficace  $B_{ij}$  vérifie les hypothèses de micro-réversibilité.

On peut alors écrire le théorème  $H$  correspondant à ces opérateurs de collision et discuter de l'équilibre mécanique.

**Proposition 1.4.** *On suppose que les sections efficaces  $(B_i)_{1 \leq i \leq I}$  et  $(B_{ij})_{i \neq j}$  sont positives presque partout.*

(a) *Pour toute fonction  $g_i \equiv g_i(v) \geq 0$ ,  $1 \leq i \leq I$ , pour qui les quantités suivantes ont un sens, on a*

$$\sum_{i=1}^I \int_{\mathbb{R}^d} Q_i^m(g_i, g_i) \ln \left( \frac{g_i}{m_i^d} \right) dv + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \int_{\mathbb{R}^d} Q_{ij}^b(g_i, g_j) \ln \left( \frac{g_i}{m_i^d} \right) dv \leq 0.$$

(b) *De plus, les trois propriétés suivantes sont équivalentes.*

i. *Pour tout  $1 \leq i, j \leq I$ ,  $i \neq j$  et  $v \in \mathbb{R}^d$ ,*

$$Q_i^m(g_i, g_i)(v) = 0, \quad Q_{ij}^b(g_i, g_j)(v) = 0.$$

ii. *Linéarité de (a) est une égalité.*

iii. *Il existe une constante  $\chi_i \geq 0$ , une température  $T > 0$  et une vitesse  $u \in \mathbb{R}^d$  telles que, pour tout  $i$ ,*

$$g_i(v) = \chi_i \left( \frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{d/2} \exp \left( -\frac{m_i}{2kT} |v - u|^2 \right), \quad (1.19)$$

où  $k$  est la constante de Boltzmann.

La démonstration s'effectue d'une façon similaire à celle de [DMS05], proposition 1, en utilisant principalement des formes faibles symétrisées des opérateurs de collision et des propriétés du logarithme.

### La limite de diffusion Maxwell-Stefan

Comme nous étudions une situation physique qui permet seulement la diffusion, on suppose qu'à l'état initial, on est à l'équilibre mécanique du point de vue des vitesses. Mais on suppose aussi que le mélange peut initialement ne pas être homogène en espace, on peut donc être éloigné de l'équilibre macroscopique. Ainsi, les données initiales pour les  $f_i$  sont supposées maxwelliennes, de même température  $T^{\text{in}}$  (ne dépendant pas de  $x$ ), et de vitesse macroscopique nulle (régime purement diffusif) :

$$f_i^{\text{in}}(x, v) = \xi_i^{\text{in}}(x) \left( \frac{m_i}{2\pi k T^{\text{in}}} \right)^{d/2} e^{-m_i |v|^2 / 2k T^{\text{in}}}.$$

On vérifie alors immédiatement que, pour tout  $i$  et presque tout  $x$ ,

$$\int_{v \in \mathbb{R}^d} v f_i^{\text{in}}(x, v) dv = 0.$$

On se place dans l'hypothèse de molécules maxwelliennes : les sections efficaces ne dépendent que de  $\omega$  et sont dans  $L^1(S^{d-1})$ . Dans le cas diffusif classique, le facteur de ré-échelonnement est le libre parcours moyen, noté ici  $\varepsilon > 0$ .

On ajoute aux  $f_i$  la dépendance en  $\varepsilon$ , elles vérifient une équation de Boltzmann ré-échelonnée dans  $\mathbb{R}_+^* \times \Omega \times \mathbb{R}^d$  :

$$\varepsilon \partial_t f_i^\varepsilon + v \cdot \nabla_x f_i^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} Q_i^{\text{m}}(f_i^\varepsilon, f_i^\varepsilon) + \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} Q_{ij}^{\text{b}}(f_i^\varepsilon, f_j^\varepsilon), \quad (1.20)$$

avec conditions aux limites de type réflexion spéculaire.

Pour chaque  $i$ , tout  $t$  et presque tout  $x$ , on s'intéresse à l'asymptotique  $\varepsilon \rightarrow 0$  :

$$\int_{\mathbb{R}^d} f_i^\varepsilon(t, x, v) dv \rightarrow \xi_i(t, x), \quad \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^d} v f_i^\varepsilon(t, x, v) dv \rightarrow N_i(t, x).$$

Comme les flux initiaux sont nuls et que les conditions aux limites sont de type spéculaire, on a immédiatement  $N_i(0, x) = 0$  pour presque tout  $x \in \Omega$ , et  $N_i(t, x) = 0$  pour tout  $t > 0$  et presque tout  $x \in \partial\Omega$ .

Par ailleurs,  $f_i^\varepsilon(t, x, v)$  converge, au moins formellement, vers l'équilibre mécanique  $f_i(t, x, v)$  décrit par (1.19) dans le théorème  $H$  :

$$f_i^\varepsilon(t, x, v) \rightarrow f_i(t, x, v) = \xi_i(t, x) \left( \frac{m_i}{2\pi k T(t, x)} \right)^{d/2} e^{-m_i |v - u(t, x)|^2 / 2k T(t, x)}.$$

Comme, pour tout  $i$ ,

$$\int_{\mathbb{R}^d} v f_i^\varepsilon(t, x, v) dv \sim \varepsilon N_i(t, x) \quad \text{quand } \varepsilon \rightarrow 0,$$

donc tend vers 0, on a nécessairement  $u \equiv 0$ . On peut aussi prouver que  $T \equiv T^{\text{in}}$ .

On peut alors obtenir les équations de Maxwell-Stefan en étudiant la limite, quand  $\varepsilon$  tend vers 0, des équations vérifiées par les moments d'ordre 0 et 1 des  $f_i^\varepsilon$  à partir de (1.20) :

- la conservation de la masse (1.14) pour l'espèce  $\mathcal{A}_i$  est simplement obtenue en intégrant (1.20) par rapport à  $v$ , en utilisant les propriétés de conservation naturelles des opérateurs de collision et en passant à la limite en  $\varepsilon$  ;

- la loi de Maxwell-Stefan (1.15) est plus compliquée à retrouver, il faut étudier soigneusement l'équation vérifiée par le moment d'ordre 1 pour obtenir (1.15) avec des coefficients de diffusion binaires vérifiant :

$$D_{ij} = \frac{(m_i + m_j)kT^{\text{in}}}{m_i m_j \|B_{ij}\|_{L^1(S^{d-1})}}.$$

### 1.2.3 Modèles de diffusion dans le poumon

L'arbre bronchique possède une structure dyadique et peut être schématiquement divisé en trois parties [Wei84]. Nous reviendrons plus bas, en 3.2.1, sur le fonctionnement de la partie supérieure des voies respiratoires (générations 0 à 16). Dans les voies distales (générations 15 à 23), les effets convectifs sont de moins en moins présents et le gaz a un comportement principalement diffusif. C'est aussi le lieu, au niveau des alvéoles pulmonaires, des échanges gazeux entre le poumon et le sang. Comme on l'a déjà souligné, le modèle le plus communément utilisé est celui de Fick, et le poumon n'y fait pas exception, voir [EP85].

Dans [B14], nous avons discuté de la pertinence des modèles de diffusion à employer, entre les lois de Fick et de Maxwell-Stefan. Nous avons d'abord reproduit numériquement l'expérience de Duncan et Toor [DT62], mettant en évidence le phénomène de diffusion « remontante » (*uphill diffusion* en anglais). Puis nous avons effectué des comparaisons numériques entre les deux modèles de diffusion.

#### L'expérience de Duncan et Toor

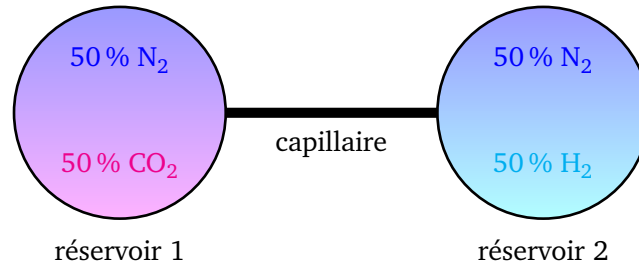


FIGURE 1.3 – Dispositif expérimental

On s'intéresse à un mélange de trois gaz, considérés comme parfaits, dans le dispositif expérimental schématisé en figure 1.3. L'ensemble des données numériques, comme les caractéristiques du dispositif ou les coefficients de diffusion binaires des espèces en présence, est disponible dans [DT62, TK93]. Initialement, le réservoir de gauche contient autant d'azote (espèce  $\mathcal{A}_2$ ) que de dioxyde de carbone (espèce  $\mathcal{A}_3$ ), et le réservoir de droite autant d'azote que d'hydrogène (espèce  $\mathcal{A}_1$ ). Puis on laisse la diffusion avoir lieu. On note ainsi qu'à  $t = 0$ , l'azote a la même concentration dans l'ensemble du dispositif. De façon évidente, la fraction molaire de chaque espèce finit par atteindre une valeur d'équilibre uniforme partout dans le dispositif :  $\xi_1^{\text{eq}} = 0,25$ ,  $\xi_2^{\text{eq}} = 0,5$  et  $\xi_3^{\text{eq}} = 0,25$ .

Ces valeurs à l'équilibre nous permettent de calculer les coefficients de diffusion classiques (dits effectifs) à l'aide des coefficients binaires, grâce à la formule de Wilke

[Wil50] :

$$F_i = (1 - \xi_i^{\text{eq}}) / \left( \sum_{j \neq i} \frac{\xi_j^{\text{eq}}}{D_{ij}} \right). \quad (1.21)$$

On s'intéresse au réservoir de gauche. Le comportement de  $\xi_3$  donné respectivement par les lois de Fick et de Maxwell-Stefan sont très similaires, comme le montre la figure 1.4b. En revanche, dans la figure 1.4a, on voit que l'azote, initialement à l'équilibre, présente un comportement très différent selon le modèle employé.

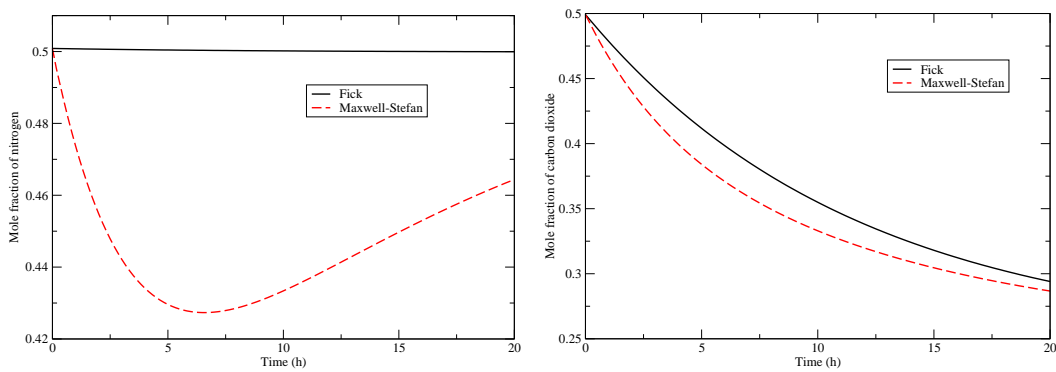


FIGURE 1.4 – Fractions molaires (a)  $\xi_2$  et (b)  $\xi_3$ , calculées par Fick et Maxwell-Stefan

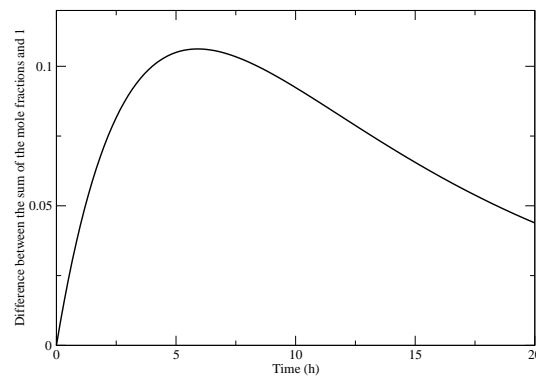


FIGURE 1.5 – Graphe de  $\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 - 1$  calculé par Fick

En fait, l'usage de la formule de Wilke (1.21) implique que les  $F_i$  sont distincts deux à deux, et dans la présente situation, avec des valeurs pouvant être très différentes. On peut alors vérifier mathématiquement et constater numériquement, comme dans la figure 1.5, que la quantité  $\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 - 1$  ne reste pas nulle au cours du temps si on utilise la loi de Fick pour le calcul.

Ce comportement physique est dû aux propriétés de friction entre les paires de molécules de chaque espèce. Les forts gradients de concentration de dioxyde de carbone et d'hydrogène engendrent des flux élevés pour ces espèces. À cause d'une friction plus

forte entre gaz carbonique et azote (par rapport à la paire hydrogène-azote), le dioxyde de carbone entraîne l'azote du réservoir de gauche vers celui de droite, alors que le gradient de concentration d'azote est initialement nul. C'est donc un des effets caractéristiques de la diffusion remontante. Les différences sont donc uniquement présentes en régime transitoire. À l'équilibre, on obtient bien sûr les mêmes valeurs par les deux calculs.

### Dans le poumon

Nous avons ensuite montré numériquement les limites du modèle de Fick dans des cas liés à la respiration, dans les voies basses. En effet, si les deux modèles semblent fournir des résultats vraiment proches chez un patient sain, ce n'est plus le cas pour un patient souffrant de broncho-pneumopathies chroniques obstructives (BPCO), du type de la bronchite chronique ou de l'emphysème. Pour rétablir une ventilation normale, le patient peut être amené à inhaler un mélange binaire d'hélium (79 %) et d'oxygène (21 %), dont le transport et la diffusion dans le système respiratoire est facilité par rapport à l'air. Comme cela est suggéré dans [TDB<sup>+</sup>79, Cha80], il s'avère que la loi de Fick n'est plus du tout appropriée *stricto sensu*, car les coefficients de diffusion binaires concernés sont assez différents (jusqu'à un facteur 4).

Les résultats obtenus dans [B14] ne sont pas concluants, mais ne concernent que des situations sans doute trop simples en deux dimensions. Au voisinage des alvéoles, pour qu'une discussion sur les modèles ait un sens, il faut que la phase transitoire de la diffusion gazeuse soit au moins de l'ordre de celle de la diffusion alvéolaire, soit 0,3 s. La réponse à apporter n'est pas encore claire, elle fait d'ailleurs actuellement l'objet de discussions au sein des groupes des projets ANR jeune de Céline Grandmont, et ANR TecSan autour de Bertrand Maury, avec Air Liquide.

### 1.2.4 Analyse mathématique et numérique des équations

La théorie de l'équation de la chaleur, basée sur la loi de Fick, est vraiment bien connue. On a déjà cité l'ouvrage de Crank [Cra75], mais on peut aussi se rapporter au livre d'Evans [Eva10]. De façon assez surprenante, il n'existe aucune théorie mathématique complète des équations de Maxwell-Stefan. En effet, la plupart des développements mathématiques sur la question s'est concentrée sur l'étude d'algorithmes numériques basés sur la description matricielle du phénomène [Gio91, EG94, EG97, Gio99]. Néanmoins, on peut ranger ces équations dans la classe des modèles de diffusion croisée, où la vitesse molaire d'une espèce (ou son flux) dépend non linéairement des autres. Ces modèles, que l'on trouve plutôt en dynamique des populations, ont été largement étudiés récemment. On pourra par exemple consulter [LN96, CJ04, BLMP09].

Dans [B12], nous considérons un cas non trivial mais simple, voisin du mélange de Duncan et Toor : un mélange de trois espèces, où deux des trois coefficients binaires sont égaux, par exemple  $D_{12} = D_{13}$ . Comme  $\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 = 1$  et  $N_1 + N_2 + N_3 = 0$ , on peut se contenter d'exprimer la fraction molaire et le flux molaire d'une espèce en fonction des grandeurs liées aux deux autres. On choisit arbitrairement de ne gérer que les espèces  $\mathcal{A}_1$  et  $\mathcal{A}_2$ . Posons  $\beta = 1/D_{12} - 1/D_{23}$ , supposé non nul. On a donc le système suivant, d'inconnues  $\xi_1$  et  $\xi_2$  :

$$\partial_t \xi_1 = D_{12} \Delta \xi_1, \quad (1.22)$$

$$\partial_t \xi_2 = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{D_{23}} + \beta \xi_1 \right)^{-1} (\nabla \xi_2 + \beta D_{12} \xi_2 \nabla \xi_1) \right]. \quad (1.23)$$

avec conditions initiales

$$\xi_1(0, \cdot) = \xi_1^{\text{in}} \in L^\infty(\Omega), \quad \xi_2(0, \cdot) = \xi_2^{\text{in}} \in L^\infty(\Omega), \quad (1.24)$$

où

$$\xi_1^{\text{in}}, \xi_2^{\text{in}} \geq 0 \quad \text{et} \quad \xi_1^{\text{in}} + \xi_2^{\text{in}} \leq 1.$$

### Un résultat d'existence et de convergence vers l'équilibre

Nous avons d'abord prouvé la

**Proposition 1.5.** *Si  $\xi_1^{\text{in}}, \xi_2^{\text{in}}$  sont des fonctions positives dans  $L^\infty(\Omega)$  et telles que  $\xi_1^{\text{in}} + \xi_2^{\text{in}} \leq 1$ , le problème (1.22)–(1.24) admet une unique solution régulière  $(\xi_1, \xi_2)$ . De plus,  $\xi_1$  et  $\xi_2$  restent positifs, vérifient  $\xi_1 + \xi_2 \leq 1$ , et la masse de chaque espèce est conservée au cours du temps.*

Nous avons ensuite considéré le problème du retour vers l'équilibre, en constatant d'abord que les constantes sont des solutions stationnaires de notre problème. Puis nous avons obtenu le

**Théorème 1.6.** *Si  $\xi_1^{\text{in}}, \xi_2^{\text{in}}$  sont des fonctions positives dans  $L^\infty(\Omega)$  et telles que  $\xi_1^{\text{in}} + \xi_2^{\text{in}} \leq 1$ , on considère  $(\xi_1, \xi_2)$  l'unique solution du problème (1.22)–(1.24). Alors les fractions molaires  $(\xi_i)$  convergent en temps grand vers*

$$\bar{\xi}_i := \|\xi_i^{\text{in}}\|_{L^1(\Omega)} / |\Omega|.$$

De plus, si  $\theta \in ]0, 1[$ , il existe  $K := K_\theta > 0$  dépendant de  $\theta$  et des coefficients de diffusion binaires, tel que

$$H : t \mapsto \frac{K}{2} \int_{\Omega} (\xi_1 - \bar{\xi}_1)^2 dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\xi_2 - \bar{\xi}_2)^2 dx$$

vérifie l'estimation :

$$H(t) \leq H(0) \exp \left( -2\theta \min(D_{12}, D_{23}) C_{d,\Omega} t \right),$$

où  $C_{d,\Omega}$  est la meilleure constante de l'inégalité de Poincaré sur  $\Omega$ .

Pour la démonstration, on a immédiatement une estimation sur  $\|\xi_1 - \bar{\xi}_1\|_{L^2(\Omega)}$ , car  $\xi_1$  est solution d'une équation de la chaleur. En majorant la dérivée en temps de  $\|\xi_2 - \bar{\xi}_2\|_{L^2(\Omega)}$ , on utilise l'estimation sur l'espèce  $\mathcal{A}_1$  pour compenser la partie de la majoration n'allant pas dans le bon sens.

### Des résultats numériques en une dimension

Nous avons écrit un schéma aux différences finies explicite pour résoudre (1.22)–(1.24) en une dimension, sur  $\Omega = ]0, 1[$ , conservant la masse totale de chaque espèce. On s'intéresse principalement à la diffusion remontante. La zone de l'espace-temps où elle peut être observée pour l'espèce  $\mathcal{A}_i$  est caractérisée par la relation  $N_i \partial_x \xi_i \geq 0$ .

Nous avons d'abord prouvé la consistance et la stabilité du schéma. Plus précisément, le schéma est d'ordre 1 en temps, 2 en espace, et il est stable au sens  $L^\infty$  sous la condition

$$\left( \max_{i \neq j} D_{ij} \right) \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}, \quad (1.25)$$

où  $\Delta t$  et  $\Delta x$  désignent respectivement les pas de temps et d'espace de la discrétisation. Le schéma que l'on a construit a clairement le même type de comportement qu'un schéma aux différences finies explicite pour l'équation de la chaleur, donc toutes ces propriétés n'ont rien de surprenant. Rappelons au passage que l'on a supposé  $D_{12} = D_{13}$ . Mais, de fait, le schéma semble rester stable sous la condition (1.25), même si l'on n'a plus d'égalité entre deux des trois coefficients.

Apparemment, le théorème 1.6 reste aussi juste même lorsqu'on perd l'égalité de deux coefficients de diffusion. En effet, en se plaçant dans une situation voisine de celle de l'expérience de Duncan et Toor, on peut observer le comportement de la fonction  $H$  (avec  $K = 1$ ) de ce théorème dans la figure 1.6a. La diffusion remontante est clairement significative en régime transitoire, dans cette situation à la Duncan et Toor, comme l'atteste la figure 1.6b.

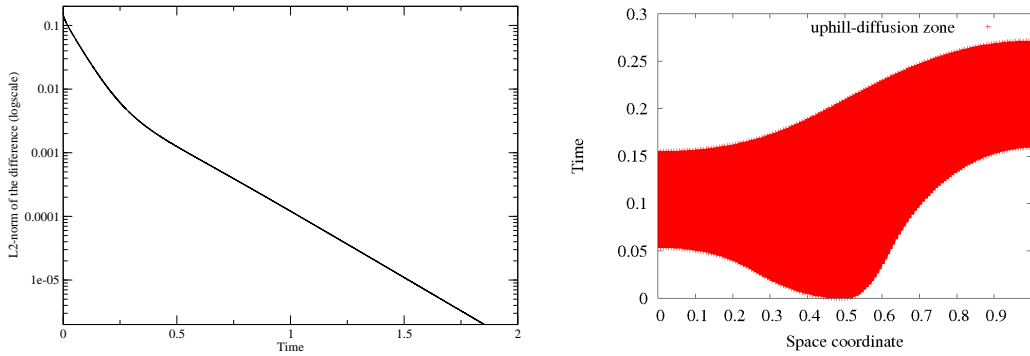


FIGURE 1.6 – (a) Graphe de  $H$  en fonction de  $t$  en échelle logarithmique, (b) zone de diffusion remontante pour l'espèce  $\mathcal{A}_2$

### 1.3 Modèle de production d'ozone

Ce travail en collaboration avec Adel Blouza et Sidi Mahmoud Kaber [B3] est placé dans le chapitre des modèles fluides bien qu'il ne relève pas directement de cette catégorie. En effet, les équations que nous y avons étudiées sont des systèmes différentiels, où la seule variable impliquée est le temps. En revanche, en liaison avec 1.2, les fonctions inconnues de nos problèmes sont des concentrations d'espèces gazeuses. Et notre contribution peut être vue comme un premier pas vers l'étude d'un système d'équations aux dérivées partielles permettant de modéliser assez simplement la production de l'ozone dans l'atmosphère en tenant compte non seulement des réactions chimiques, comme nous l'avons déjà fait, mais aussi des échelles d'espace, d'une importance bien sûr cruciale dans les modèles de mouvement de l'air dans l'atmosphère.

Le modèle de production d'ozone que nous avons étudié, non linéaire et réaliste, est valable dans la troposphère. La pollution par l'ozone est l'un des problèmes envi-

ronnementaux majeurs de ces trente dernières années (voir [Spo07] et sa bibliographie). La présence massive de  $\text{NO}_2$  dans la troposphère, principalement au-dessus des grandes villes, couplée avec celle d'hydrocarbures divers, induit une chaîne de réactions préférentielles produisant l'ozone  $\text{O}_3$ , en particulier pendant les étés très ensoleillés. La concentration d'ozone atteint alors un niveau qui peut s'avérer dangereux pour l'homme, mais aussi pour l'ensemble de l'écosystème.

Ce travail a été réalisé dans le cadre du projet ANR PiTAC du programme « Calcul intensif et simulation », supervisé par Yvon Maday.

### 1.3.1 Algorithmes pararéels

Nous avons voulu concevoir des algorithmes pararéels, introduits par Lions, Maday et Turinici [LMT01], qu'on puisse coupler avec des méthodes de réduction de systèmes issus de la cinétique chimique. Nous nous sommes d'abord intéressés au cas de la chimie mono-moléculaire, pour laquelle avait été obtenue une méthode de réduction efficace [BCH00], en reprenant plus en détail l'exemple étudié dans [Mad07].

Expliquons brièvement le principe de ces algorithmes pararéels. On dispose d'un problème d'évolution décrit par une équation différentielle, que l'on souhaite résoudre numériquement. Dans un premier temps, on approche la solution de l'équation sur une grille de discrétisation grossière, puis on résout localement ces mêmes équations sur des sous-grilles plus fines à l'aide de machines parallèles. On peut prouver que la méthode itérative ainsi construite est du même ordre de précision qu'un algorithme séquentiel construit sur la grille fine constituée des sous-grilles. Les propriétés mathématiques de tels algorithmes ont fait l'objet de nombreux travaux, on peut par exemple se référer à [Bal05, GV07, GH08]. Les domaines d'application sont eux aussi nombreux et les références données ici ne sont souvent que des travaux parmi d'autres : mathématiques financières [BM02], mécanique des fluides [FC03], chimie quantique [MST07], *etc.*

On considère le problème de Cauchy d'inconnue  $y : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^d$ ,  $d \geq 1$ ,

$$y'(t) = g(t, y(t)), \quad \text{avec } y(0) = y^{\text{in}} \in \mathbb{R}^d, \quad (1.26)$$

où  $g : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  est donnée. On veut approcher la solution  $y$  de (1.26) sur  $[0, T]$ ,  $T > 0$ . On choisit des temps intermédiaires réguliers  $0 = T_0 < T_1 < \dots < T_N = T$  et on pose  $\Delta T = T_{n+1} - T_n$ .

L'algorithme pararéel fait appel à deux solveurs : un fin  $\mathcal{F}_{\delta t}$ , utilisant un pas de temps fin  $\delta t > 0$ , et un grossier  $\mathcal{C}_{\Delta T}$ , utilisant un pas de temps grossier  $\Delta T = s\delta t$ ,  $s \in \mathbb{N}^*$ , souvent  $s \gg 1$ . La quantité  $\mathcal{C}_{\Delta T}(T_{n+1}; T_n, z)$  est une approximation, à  $T_{n+1}$ , de la solution de (1.26) sur  $[T_n, T_{n+1}]$ , avec donnée initiale  $z$  à  $T_n$ . Le solveur fin travaille en parallèle sur chaque intervalle  $[T_n, T_{n+1}]$ . La quantité  $\mathcal{F}_{\delta t}(T_{n+1}; T_n, z)$  est une approximation, à  $T_{n+1}$ , de la solution de (1.26) sur  $[T_n, T_{n+1}]$ , avec donnée initiale  $z$  à  $T_n$ . On peut par exemple utiliser un Runge-Kutta RK4 pour le fin et un schéma d'Euler pour le grossier. La suite pararéelle globale  $(y_n^k)_{n,k}$  est alors construite par récurrence sur  $n \in \mathbb{N}$  et sur l'indice d'itération pararéelle  $k \in \mathbb{N}$  :

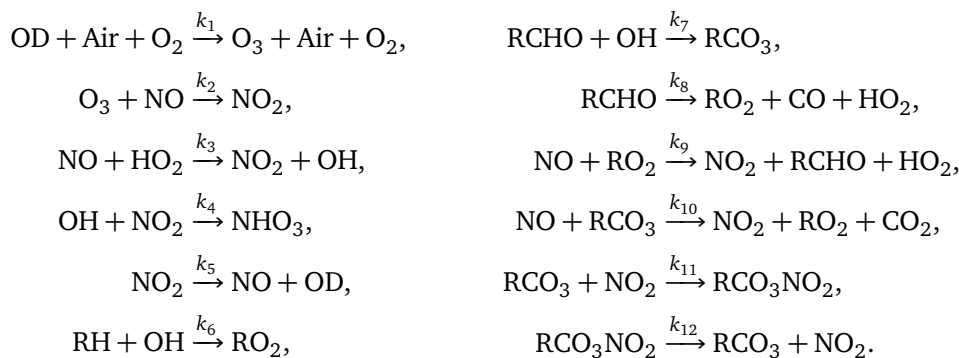
$$\begin{aligned} y_0^k &= y^{\text{in}}, \\ y_{n+1}^0 &= \mathcal{C}_{\Delta T}(T_{n+1}; T_n, y_n^0), \\ y_{n+1}^{k+1} &= \mathcal{C}_{\Delta T}(T_{n+1}; T_n, y_n^{k+1}) + \mathcal{F}_{\delta t}(T_{n+1}; T_n, y_n^k) - \mathcal{C}_{\Delta T}(T_{n+1}; T_n, y_n^k). \end{aligned}$$



En étudiant la limite  $k \rightarrow +\infty$ , on peut montrer que  $y_n^k$  est une bonne approximation de la solution fine à  $T_n$ , lorsque  $k$  n'est pas trop petit. Dans l'immense majorité des situations, de petites valeurs de  $k$  suffisent.

### 1.3.2 Ozone

Le modèle de production d'ozone que nous avons utilisé vient de [ABBD94], il est valable en temps pas trop grand. Il fait appel à 16 espèces intervenant dans 12 réactions chimiques, ce qui en fait un modèle simple. L'air (en tant que mélange gazeux), l'oxygène, ainsi que la vapeur d'eau (qui n'apparaît pas explicitement dans les réactions, mais dont la présence est absolument nécessaire), sont considérées comme étant très largement en excès. Si on note  $k_r$ , pour chaque réaction  $r$ , la constante de réaction correspondante, les équations de réactions chimiques s'écrivent :



Je ne détaille pas le système différentiel de cinétique chimique associé. Il suffit de savoir que, si l'on note  $y_1, \dots, y_{16}$  les concentrations de chacune des espèces en présence, et  $v_1, \dots, v_{12}$  les vitesses de réaction, exprimables en fonction des concentrations et des constantes de réaction, on obtient un système de la forme  $y' = \mathcal{S}v$ , où  $\mathcal{S}$  est une matrice rectangulaire, appelée matrice stœchiométrique, est constituée des coefficients stœchiométriques des espèces en présence dans chacune des réactions chimiques.

La méthode de réduction que nous avons choisie s'appuie sur l'hypothèse des états quasi-stationnaires [BAO63] (voir aussi [SS89] pour une étude mathématique significative) : une espèce  $\mathcal{A}$  est en état quasi-stationnaire si son taux de production est très proche de son taux de consommation. Mais cela ne veut pas dire que  $y_{\mathcal{A}} \equiv \text{constante}$ . On obtient simplement une relation algébrique reliant  $y_{\mathcal{A}}$  aux valeurs instantanées des autres concentrations. On a ainsi bien réduit la taille de notre système différentiel, ici de 12 à 8 équations.

L'algorithme pararéel, couplé à cette méthode des états quasi-stationnaires, converge après trois itérations. Le calcul s'avère quatre fois plus rapide que par le seul algorithme fin. L'évolution des concentrations d'espèces, comme celle de l'ozone en figure 1.7, est très satisfaisante par rapport à la solution de référence donnée par l'algorithme fin.

Néanmoins, l'algorithme pararéel couplé à la méthode de réduction ne permet pas, tel quel, la conservation des invariants stœchiométriques. Aussi on ajoute l'utilisation d'une méthode de projection, assez classique en pararéel, permettant de minimiser ces

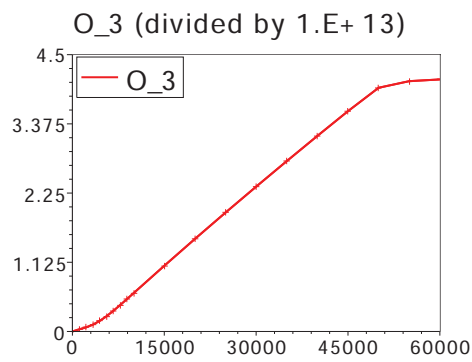


FIGURE 1.7 – Concentration d'ozone : solution fine (plein) et parallèle réduite (+) sur  $[0, 60\,000\text{ s}]$ .

erreurs numériques, voir figure 1.8, notamment le second graphique, où l'on constate un gain de précision d'un facteur 10.

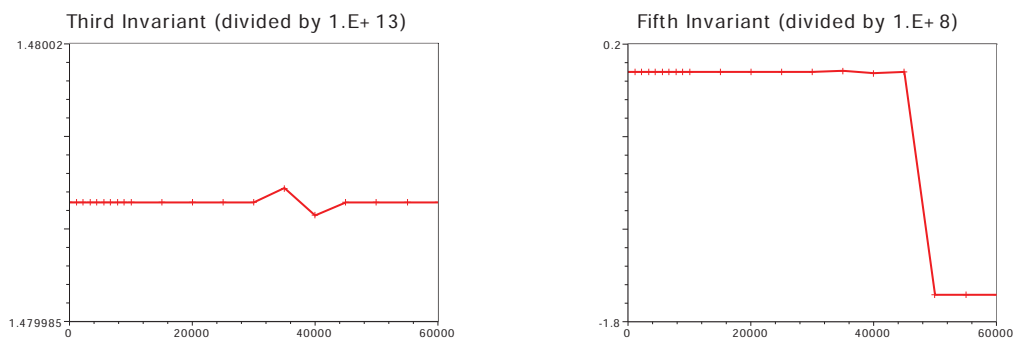


FIGURE 1.8 – Deux invariants stœchiométriques issus du calcul fin (plein) et parallèle réduit avec projection (+) sur  $[0, 60\,000\text{ s}]$ .



## Chapitre 2

# Modèles cinétiques

### Sommaire

<b>2.1 Sociophysique</b>	<b>29</b>
2.1.1 Historique	29
2.1.2 Tendance au consensus	30
<b>2.2 Consensus et réflexion personnelle</b>	<b>31</b>
2.2.1 Description et propriétés mathématiques du modèle	31
2.2.2 Expériences numériques	32
2.2.3 Limite d'opinion quasi-invariante	33
<b>2.3 Conciliants et contrariants</b>	<b>35</b>
2.3.1 Description	35
2.3.2 Tests numériques	36
<b>2.4 Influence des médias, pluralisme politique</b>	<b>38</b>
2.4.1 Propriétés du modèle	39
2.4.2 Expériences numériques	40

Dans ce chapitre, je présente mes travaux sur la formation de l'opinion. Ils sont basés sur la théorie cinétique des gaz appliquée à la sociophysique. Cette branche de la physique est voisine de l'éconophysique, où les contributions cinétiques ont été nombreuses ces dernières années, à commencer par [CPT05]. On pourra se référer à l'article de revue dédié à l'éconophysique [CMPP10].

Avant d'évoquer ma contribution, il faut préalablement donner quelques précisions sur ce qu'est la physique appliquée à la sociologie.

## 2.1 Sociophysique

### 2.1.1 Historique

La mécanique statistique est utilisée avec succès pour décrire des systèmes physiques composés d'un grand nombre d'entités élémentaires, des particules, interagissant entre elles. L'application de cette méthodologie pour de nouvelles applications en économie ou en sociologie s'appuie sur le fait qu'un comportement global peut être obtenu dans une succession de processus élémentaires. Ainsi, en sociologie, les particules sont des individus qui interagissent avec d'autres membres de la population par

des mécanismes microscopiques. L'idée d'utiliser des méthodes et des concepts issus de la physique en sociologie remonte à Weidlich [Wei71] en 1971. Une dizaine d'années plus tard, Galam, Gefen et Shapir [GGS82] sont les premiers à employer le terme de « sociophysique » pour parler de leur approche.

Bien entendu, cette approche n'est pas exempte de difficultés conceptuelles. Par exemple, les individus ne sont pas de simples agents passifs subissant les interactions, et leur comportement ne suit pas, en règle générale, des formules mathématiques : les êtres humains ne sont pas des particules élémentaires. Néanmoins, de la même façon qu'en physique statistique, de nombreuses caractéristiques qualitatives (et parfois quantitatives) semblent ne pas dépendre du fonctionnement microscopique des interactions entre individus. Il est un fait qu'aujourd'hui la sociophysique est reconnue comme un champ de recherche au sein de la physique statistique.

On trouve de nombreuses questions en sociophysique : outre la formation de l'opinion, à laquelle je me suis intéressé, sont abordés des sujets aussi variés que la dynamique culturelle, la formation de hiérarchies, les réseaux sociaux, *etc.* Le lecteur pourra trouver une liste plus complète de thèmes et des outils associés dans les articles de revue [Gal08, CFL09].

Dans la littérature, on trouve un grand nombre de stratégies pour la formation de l'opinion. Certaines font appel à des variables d'opinion discrètes dans le contexte de modèles d'Ising [GGS82, GM91, SWS00]. L'alternative consiste à utiliser une variable d'opinion continue, ce qui semble avoir un sens : la réponse à une question binaire est « oui » ou « non », mais peut être nuancée si nécessaire, en particulier si l'on est proche de l'état « sans opinion ». Dans [DNAW00], les opinions des  $N$  individus considérés vivent dans le segment  $[0, 1]$ . Chacun interagit aléatoirement avec l'un de ses voisins, suivant un mécanisme très proche d'une collision de type Boltzmann, et la population finit par atteindre un état d'équilibre. On peut bien entendu tenir compte de nombreux autres phénomènes, nous prenons quelques exemples ci-dessous.

### 2.1.2 Tendances au consensus

Le caractère aléatoire est une notion-clé dans le processus de formation de l'opinion. En effet, le comportement d'un individu peut vraiment changer aléatoirement, tout comme la nature de son interaction avec les autres membres de la population. De plus, les effets d'un phénomène extérieur ne sont pas non plus nécessairement déterministes. Tout cela mène naturellement à l'approche cinétique, qui prend en compte de façon déterministe un phénomène sous-jacent qui, lui, est aléatoire. Elle est basée sur une équation cinétique de type Boltzmann décrivant l'évolution au cours du temps de la fonction de distribution. Avec Francesco Salvarani, nous avons écrit un article de revue sur les modèles cinétiques en sociophysique [B20], où sont évoqués la plupart des travaux issus de la théorie cinétique pour la sociologie, à commencer par les travaux de Helbing [Hel93b, Hel93a], pionnier dans cette direction.

Le trait commun à la majeure partie des modèles de formation d'opinion est la tendance au consensus, issue des règles de collision microscopiques. Cela signifie que l'interaction entre deux individus tend naturellement à concentrer les opinions de la population sur certaines valeurs, comme l'opinion médiane, ou, dans d'autres cas, sur des valeurs périodiques. Les divers modèles sur lesquels j'ai travaillé montrent la compétition entre ces interactions binaires et d'autres phénomènes sociaux.

## 2.2 Consensus et réflexion personnelle

### 2.2.1 Description et propriétés mathématiques du modèle

Dans notre premier article [B18], Francesco Salvarani et moi-même explorons la formation de l'opinion relativement à une question binaire, de type référendum. Le modèle est fondé sur une idée de Ben-Naim [BN05], également exploitée par Toscani [Tos06] : la réflexion personnelle est assimilable à un phénomène diffusif. Les modèles étudiés dans [Tos06] et [B18] reposent donc sur la compétition entre deux phénomènes : les interactions binaires entre individus, considérées comme des collisions, et la réflexion personnelle, traitée comme un processus de diffusion. La variable  $x$  vit dans  $[-1, 1]$ , et les deux valeurs  $\pm 1$  correspondent aux opinions extrêmes. La principale différence entre notre modèle et celui de Toscani réside dans le fait que ce dernier ajoute le terme diffusif dans les règles de collision, alors que nous l'avons intégré dans l'équation aux dérivées partielles.

Dans [B18], les règles de collision s'écrivent :

$$x' = \frac{x + x_*}{2} + \eta(x) \frac{x - x_*}{2}, \quad (2.1)$$

$$x'_* = \frac{x + x_*}{2} + \eta(x_*) \frac{x_* - x}{2}, \quad (2.2)$$

où  $x$  et  $x_*$  sont les opinions pré-collisionnelles,  $x'$  et  $x'_*$  les opinions post-collisionnelles. La fonction  $\eta$  est un coefficient d'attraction : en général, c'est une fonction régulière décrivant le degré d'attraction de l'opinion médiane par rapport à l'opinion initiale de l'agent. On suppose que  $\eta([-1, 1]) \subset [0, 1[$  pour empêcher l'opinion de sortir de  $[-1, 1]$ . Le mécanisme (2.1)–(2.2) traduit le fait qu'une opinion affirmée est moins attirée vers l'opinion médiane qu'une opinion plus faible. La réflexion personnelle est ensuite prise en compte comme un terme mésoscopique dans l'équation cinétique, dont une solution  $f$  est une fonction de distribution de la population dépendant du temps et de l'opinion :

$$\partial_t f = \partial_x (\alpha \partial_x f) + Q(f, f), \quad (2.3)$$

avec condition initiale :  $f(0, \cdot) = f^{\text{in}} \in L^1(-1, 1)$ . La fonction  $\alpha$  dépend seulement de la variable d'opinion, et contient l'information qu'une opinion forte est plus stable qu'une opinion faible. On la suppose paire et vérifiant  $\alpha(\pm 1) = 0$ , cette dernière propriété assurant que la diffusion empêche aussi l'opinion de sortir de  $[-1, 1]$ . L'opérateur de collision  $Q(f, f)$  s'écrit facilement sous forme faible. Si  $\varphi \equiv \varphi(x)$  est une fonction-test adéquate, on a

$$\langle Q(f, f), \varphi \rangle = \beta \iint_{[-1, 1]^2} f(t, x) f(t, x_*) [\varphi(x') - \varphi(x)] dx_* dx, \quad (2.4)$$

où  $\beta > 0$  décrit le taux d'interaction, choisi constant ici.

Les propriétés naturelles du noyau de collision et de  $\alpha$  permettent d'obtenir la conservation de la masse totale et le caractère borné des moments d'ordre supérieur. Puis nous obtenons le résultat d'existence suivant.

**Théorème 2.1.** *Soit  $f^{\text{in}} \in L^1(-1, 1)$  à valeurs positives et  $T > 0$ . Alors le problème (2.3) à donnée initiale  $f^{\text{in}}$  admet une solution faible positive  $f \in L^\infty(0, T; L^1(-1, 1))$ .*

La démonstration s'appuie essentiellement sur une linéarisation de notre problème, sur un résultat issu de [CMP98], et sur le théorème de convergence dominée.

### 2.2.2 Expériences numériques

Pour répondre au référendum, les quantités d'intérêt sont :

$$I_-(t) = \int_{-1}^0 f(t, x) dx \quad \text{et} \quad I_+(t) = \int_0^1 f(t, x) dx,$$

représentant la fraction de la population (si  $\|f^{\text{in}}\|_{L^1(-1,1)} = 1$ , ce qui est systématiquement le cas ci-dessous) respectivement en faveur de l'opinion négative et de l'opinion positive.

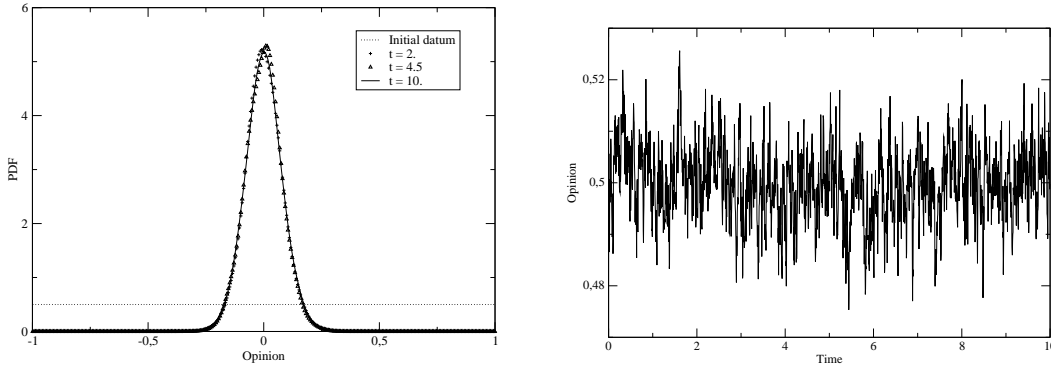


FIGURE 2.1 – (a) Profil de  $f$  pour différents temps, (b) graphe de  $I_+$  en fonction de  $t$ , pour une donnée initiale constante

On choisit  $f^{\text{in}} \equiv 1/2$ . Quand il n'y a pas de diffusion, en temps grand,  $f$  se comporte en masse de Dirac centrée en 0, et on obtient un graphe similaire à la figure 1 de [DNAW00], ce qui constitue une forme de validation du modèle. Si on branche la diffusion,  $f$  ne peut plus tendre vers une masse de Dirac en 0 mais atteint rapidement un équilibre, comme le montre la figure 2.1a. Cependant, sur la figure 2.1b, on voit de fortes oscillations de  $I_+$  au cours du temps, montrant que la situation par rapport au référendum est imprévisible.

Évoquons maintenant deux situations moins triviales.

#### Deux groupes opposés de répartition symétrique

On choisit une donnée initiale paire et nulle autour de 0, qualifiée de bimodale centrée. Une nouvelle fois, au bout d'un temps très court, la solution atteint un équilibre. Les profils de  $f$ , à  $t = 0$  et à un temps où l'on est proche de l'équilibre, sont donnés en figure 2.2a. Le support de  $f$  est largement modifié, puisqu'il devient un segment approximativement centré en 0. Le résultat d'un sondage n'est pas pour autant très différent de la situation initiale, comme le montre la figure 2.2b, mais des variations autour de 50 % restent possibles. Nous retrouvons la conclusion obtenue par Galam [Gal97] dans une situation initiale très proche : au sein d'un groupe de représentation équilibré, l'échange favorise le consensus.

#### Deux groupes opposés de répartition asymétrique

On considère un autre cas très proche d'une situation étudiée dans [Gal97]. La donnée initiale est un plateau dans les  $x$  négatifs et une masse de Dirac en 1 du côté

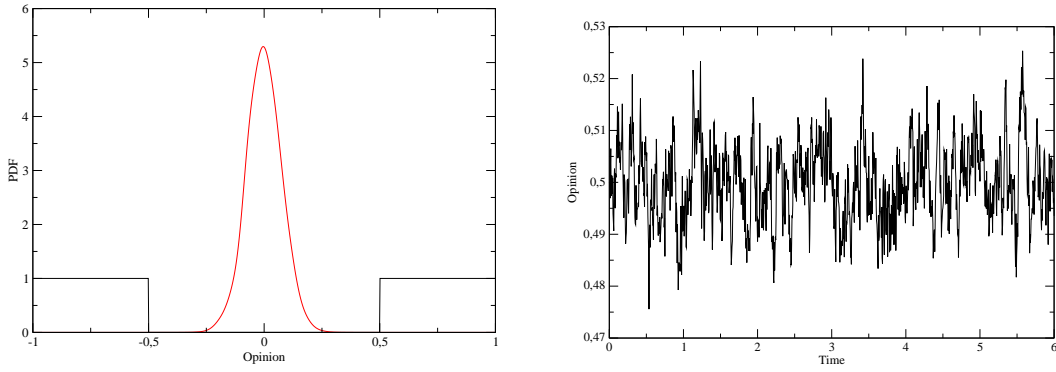


FIGURE 2.2 – (a) Profil de  $f$  pour différents temps, (b) graphe de  $I_+$  en fonction de  $t$ , pour une donnée initiale bimodale centrée

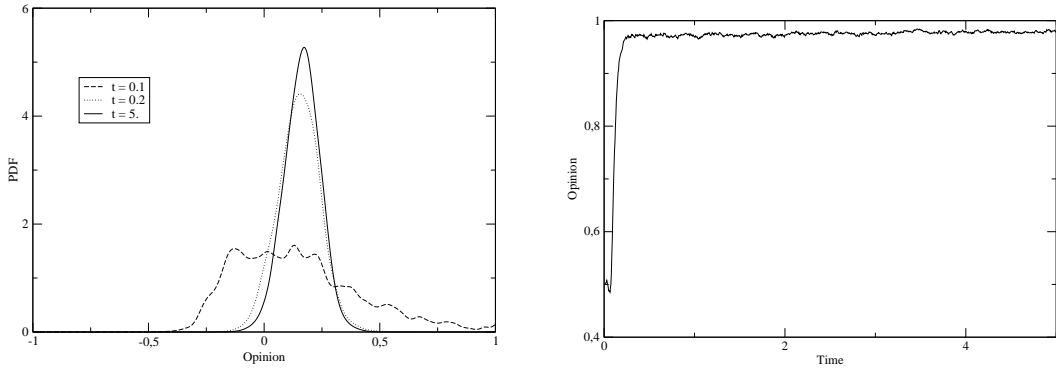


FIGURE 2.3 – (a) Profil de  $f$  pour différents temps, (b) graphe de  $I_+$  en fonction de  $t$ , pour une donnée initiale asymétrique

positif. La figure 2.3a montre trois profils de  $f$  au cours du temps. La fonction de distribution semble atteindre rapidement un équilibre en temps grand, une fois encore. De plus, le graphe de  $I_+$  représenté en figure 2.3b permet une nouvelle fois de retrouver la conclusion obtenue dans [Gal97] pour ce type de donnée initiale : au sein d'un groupe de représentation déséquilibré, l'échange favorise le groupe dont l'opinion était initialement la plus affirmée.

### 2.2.3 Limite d'opinion quasi-invariante

Lorsque l'on considère une équation cinétique, il est souvent difficile d'obtenir une solution exacte. Aussi on s'intéresse souvent au comportement des solutions suivant certaines asymptotiques. En théorie cinétique, les modèles asymptotiques sont souvent plus simples que les modèles de départ, par exemple du type Fokker-Planck.

Dans [B19], toujours avec Francesco Salvarani, je me suis intéressé à la question de la limite d'opinion quasi-invariante pour le modèle de [B18]. On suppose que les effets collisionnels et diffusifs sont petits, mais d'échelles comparables.

La fonction d'attraction  $\eta$  utilisée dans les règles de collision (2.1)–(2.2) est maintenant considérée comme une constante proche de 1, c'est-à-dire  $\eta = 1 - 2\varepsilon$ ,  $0 < \varepsilon < 1/2$ .



Ainsi, (2.4) devient, à l'ordre 2 en  $\varepsilon$  :

$$\langle Q(f_\varepsilon, f_\varepsilon), \varphi \rangle = \beta \iint_{(-1,1)^2} f_\varepsilon(t, x) f_\varepsilon(t, x_*) \varphi'(x) (x_* - x) dx_* dx + \mathcal{O}(\varepsilon^2),$$

pour toute fonction-test  $\varphi$ . Le coefficient de diffusion  $\alpha$  s'écrit  $\alpha_\varepsilon(x) = \varepsilon^k \alpha(x)$  pour tout  $x$ , où  $k > 0$  et  $\alpha$  ne dépend pas de  $\varepsilon$ .

Nous discutons de la limite, quand  $\varepsilon$  tend vers 0, de la suite des fonctions de distribution  $(f_\varepsilon)$ , suivant la valeur du paramètre  $k$ , pour des temps ré-échelonnés en  $\varepsilon$  :  $\tau = \varepsilon t$ . On obtient trois régimes différents : un régime à collision dominante ( $k > 1$ ), un régime à diffusion dominante ( $k < 1$ ) et un régime équilibre ( $k = 1$ ), où le noyau de collision est remplacé par deux termes, l'un linéaire et l'autre non linéaire.

### Les régimes non équilibres

Dans la situation où  $k \neq 1$ , on peut démontrer que la limite  $g$  ré-échelonnée de  $(f_\varepsilon)$  quand  $\varepsilon$  tend vers 0 vérifie des équations très simples et se comporte asymptotiquement en temps grand comme une masse de Dirac centrée en l'opinion initiale moyenne si  $k > 1$ , et comme la constante  $\|f^{\text{in}}\|_{L^1(-1,1)}/2$  si  $k < 1$ . Sous certaines conditions, nous avons aussi obtenu une vitesse de convergence exponentielle. Sociologiquement, cela s'interprète clairement. À collisions dominantes, on retrouve la tendance générale au consensus autour de l'opinion initiale moyenne, voir [DNAW00]. Soumise à la seule réflexion personnelle, aucune tendance ne se dégage, et l'opinion de la population tend asymptotiquement vers l'uniformité.

### Le régime équilibre

On se place ensuite dans le cas  $k = 1$ , et on choisit  $\alpha$  sous la forme  $\alpha(x) = 1 - x^2$ . La fonction inconnue  $g$  obtenue quand  $\varepsilon$  tend vers 0 vérifie l'équation aux dérivées partielles suivante, au sens faible en  $x$ , posée pour  $\tau \in \mathbb{R}_+$  :

$$\partial_\tau g - \kappa \partial_x \left[ (1 - x^2) \partial_x g \right] = \beta \partial_x (xg) - \beta m_1^{\text{in}} \exp(-2\tau) \partial_x g, \quad (2.5)$$

avec condition initiale  $g(0, \cdot) = f^{\text{in}} \in L^1(-1, 1)$ , et

$$m_1^{\text{in}} = \int_{-1}^1 f^{\text{in}}(x) x dx.$$

Nous prouvons que la solution stationnaire est de la forme  $q(x) = \xi(1 - x^2)^{\beta/2}$ , où la constante  $\xi$  est choisie de sorte que  $\|q\|_{L^1} = 1$ . Puis nous obtenons, par un argument de compacité, l'existence d'une solution à (2.5). Plus précisément, on a le

**Théorème 2.2.** *Le problème (2.5) posé pour  $\tau \in \mathbb{R}_+$ , au sens faible en  $x$ , de donnée initiale positive  $f^{\text{in}} \in H^p(-1, 1)$ , admet une solution positive dans  $C([0, T]; H^p(-1, 1))$ , pour tout  $T > 0$ . Quand  $p \geq 2$ , la solution est unique dans  $H^p$ .*

L'estimation de vitesse de convergence demande plus d'hypothèses. Comme la fonction  $\alpha$  choisie vérifie

$$K := \sup_{x \in ]-1, 1[} \left[ (1 - x) \int_{-1}^x \frac{(1 + y)^2}{\alpha(y)} dy \right]^{1/2} < +\infty,$$

on peut utiliser un résultat tiré de [CW00], sur les inégalités de Poincaré à poids en une dimension. On peut effectivement vérifier numériquement que  $K \in ]0,76; 0,77[$ . On s'appuie alors sur le résultat précédent pour démontrer le

**Théorème 2.3.** *Soit  $f^{\text{in}}$  une fonction positive à support compact, appartenant à  $H_0^2(-1, 1)$  et de masse 1. On suppose que  $0 < \beta < 1/K$ . Alors la solution  $g$  du problème d'équilibre (2.5) posé pour  $\tau \in \mathbb{R}_+$ , au sens faible en  $x$ , de donnée initiale  $f^{\text{in}}$ , converge à vitesse exponentielle en temps grand vers la solution stationnaire  $q$ .*

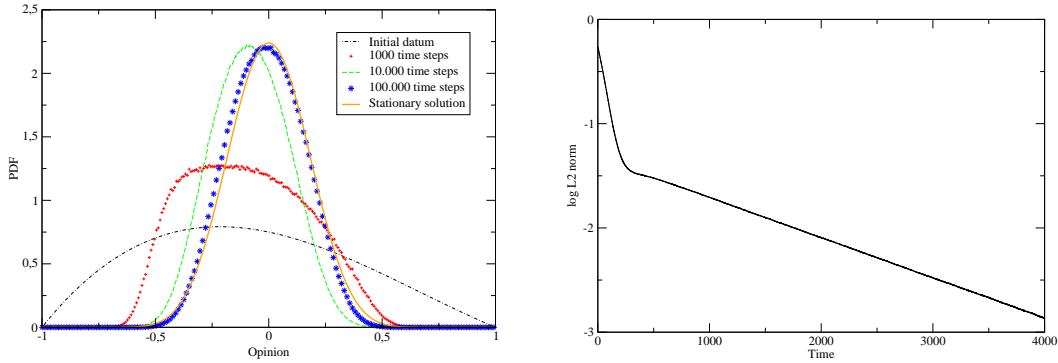


FIGURE 2.4 – Convergence de  $f_\varepsilon$  vers la solution stationnaire : (a) profils de  $f_\varepsilon$  pour divers temps, (b) graphe de  $\ln \left( \|f_\varepsilon - q\|_{L^2}^2 \right)$  en fonction du temps

On peut vérifier numériquement que  $f_\varepsilon$ , sur la figure 2.4 avec  $\varepsilon = 10^{-4}$ , a un comportement semblable à celui de  $g$ , et que la vitesse de convergence reste exponentielle.

Les deux autres articles que j'ai coécrits sur le sujet [B17, B16] font appel à d'autres phénomènes sociaux, comme la présence de contrariants, l'effet des médias et la prise en compte du pluralisme politique. On peut aussi évoquer le travail de Düring, Markowich, Pietschmann et Wolfram [DMPW09] sur la présence de chefs à l'influence forte dans un groupe.

## 2.3 Conciliants et contrariants

Dans [Gal04, Gal07], Galam introduit et utilise la notion d'agents contrariants pour expliquer certains phénomènes électoraux récents majeurs. Il y affirme que ces individus ne peuvent être convaincus par des arguments standards et ont un schéma mental différent de la plupart des autres membres de la population. Dans les faits, ils peuvent décider de s'opposer à l'opinion majoritaire, quelle qu'elle soit.

### 2.3.1 Description

Avec Aurore Mercier et Francesco Salvarani, dans [B16], nous avons utilisé une notion légèrement différente de contrariants, par opposition aux individus conciliants, déjà évoqués dans [B18]. Si un conciliant tend toujours au consensus, le contrariant interagissant avec lui aura tendance à choisir l'opinion opposée à celle qu'il aurait eue s'il était conciliant, au lieu de se contenter d'adopter une opinion plus tranchée que la moyenne des deux opinions.

Plus précisément, on considère une population majoritairement composée de conciliants, et minoritairement de contrariants. Nous avons étudié deux types de comportement entre individus issus respectivement des deux groupes. On note  $x$  l'opinion d'un conciliant,  $x_*$  l'opinion d'un contrariant, avant interaction, et  $x'$ ,  $x'_*$  les opinions post-collisionnelles correspondantes.

Le premier type d'interaction s'écrit :

$$x' = \frac{x + x_*}{2} + \eta(x) \frac{x - x_*}{2}, \quad (2.6)$$

$$x'_* = -\theta(x_*) \left[ \frac{x_* + x}{2} + \eta(x_*) \frac{x_* - x}{2} \right]. \quad (2.7)$$

Le conciliant réagit de la même façon que dans [B18], alors que le contrariant utilise l'opinion post-collisionnelle qu'il aurait s'il était conciliant pour prendre l'opinion opposée et modifiée par une fonction de réaction  $\theta$ .

Dans le second type d'interaction,  $x'$  est encore donné par (2.6), mais la nouvelle valeur de  $x'_*$  est cette fois calculée comme

$$x'_* = \begin{cases} 1 - \frac{(1 - x')(1 - x_*)}{(1 - x)} & \text{si } x < x_*, \\ x_* & \text{si } x = x_*, \\ \frac{(1 + x')(1 + x_*)}{(1 + x)} - 1 & \text{si } x > x_*. \end{cases} \quad (2.8)$$

L'opinion du contrariant tend vers  $\pm 1$ , simplement pour rester éloignée de l'opinion de son interlocuteur.

Nous avons bien sûr défini pour chaque situation des règles de collision entre deux contrariants, très semblables à (2.7) ou à (2.8).

Indépendamment des mécanismes microscopiques, les deux fonctions de distribution  $f$  et  $g$  pour les conciliants et les contrariants vérifient le système d'équations cinétiques suivant, avec données initiales  $f^{\text{in}}$  et  $g^{\text{in}}$  :

$$\partial_t f = Q(f, f) + R_1(f, g), \quad (2.9)$$

$$\partial_t g = R_2(f, g) + S(g, g), \quad (2.10)$$

où  $Q(f, f)$  est le noyau de collision associé à l'interaction entre conciliants,  $R_1(f, g)$  et  $R_2(f, g)$  les noyaux mixtes, et  $S(g, g)$  le noyau pour l'interaction entre contrariants. Nous avons obtenu un résultat d'existence pour  $f$  et  $g$  dans  $L^\infty(0, T; L^1(-1, 1))$ , et la démonstration utilise des arguments voisins de ceux du théorème 2.1.

### 2.3.2 Tests numériques

Les quantités d'intérêt dans les deux situations sont cette fois-ci

$$I_-(t) = \int_{-1}^0 [f(t, x) + g(t, x)] dx \quad \text{et} \quad I_+(t) = \int_0^1 [f(t, x) + g(t, x)] dx,$$

et dans tous les tests qui suivent, on a  $\|f^{\text{in}}\|_{L^1(-1, 1)} = 1$  et  $\|g^{\text{in}}\|_{L^1(-1, 1)} = 0, 1$ .

### Avec les règles de collision (2.6) et (2.7) – modèle n° 1

Dans cette première situation,  $f$  et  $g$  convergent rapidement tous deux vers une masse de Dirac centrée en 0, même si les données initiales ne sont pas elles-mêmes centrées en 0. Par conséquent, la courbe représentative de  $I_+$  de la figure 2.5 a rapidement une asymptote à 0,55, mais avec des inversions de majorité possibles pendant la période transitoire : de tels contrariants peuvent donc avoir un rôle important dans les changements de majorité, à court terme.

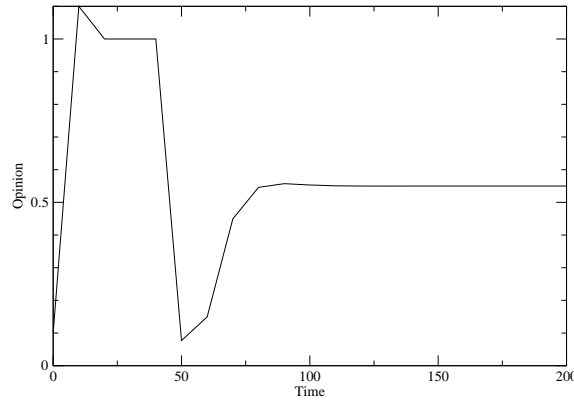


FIGURE 2.5 – Modèle n° 1 : graphe de  $I_+$  en fonction de  $t$

### Avec les règles de collision (2.6) et (2.8) – modèle n° 2

La seconde situation offre davantage de diversité, même si le résultat ne change pas fondamentalement. Les deux fonctions de distribution ont un support disjoint initialement. La distribution des conciliants ne prend aucune forme préférentielle, comme on le voit clairement sur la figure 2.6.

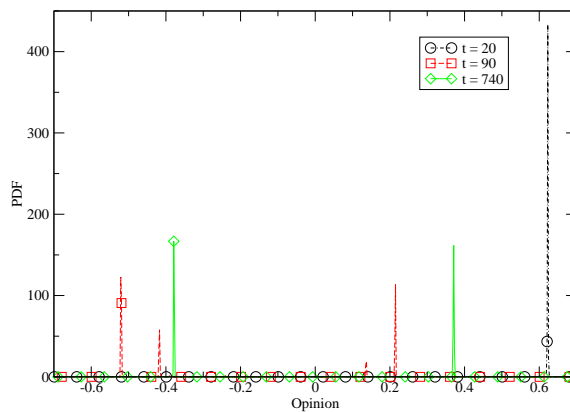


FIGURE 2.6 – Modèle n° 2 : graphe de  $f$  à divers instants

En revanche, la figure 2.7 nous permet de constater que  $g$  se concentre autour des deux valeurs extrêmes, comme attendu.

Enfin, contrairement au premier modèle,  $I_+$  présente beaucoup plus de variations

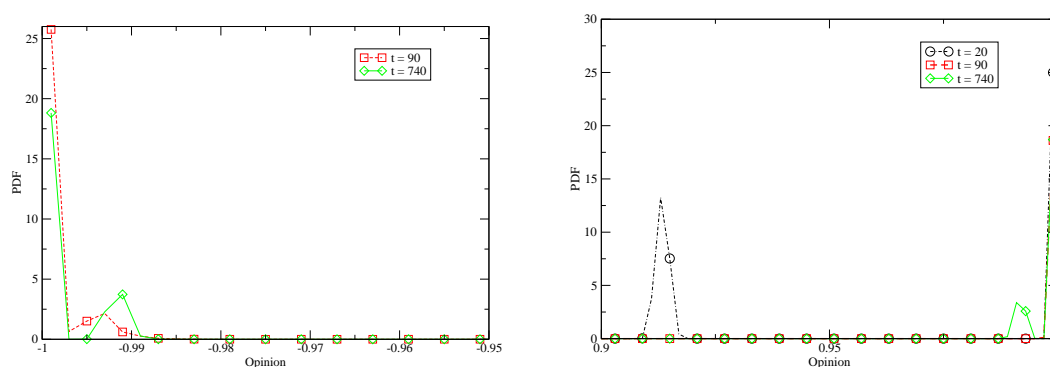


FIGURE 2.7 – Modèle n° 2 : graphe de  $g$  près de (a)  $-1$ , et de (b)  $+1$ , à divers instants

dans la figure 2.8. La présence des contrariants aux valeurs extrêmes semble politiquement plutôt réaliste et induit ces variations. Elle induit aussi parfois, mais rarement, des changements de majorité, empêchant ainsi la formation asymptotique d'un équilibre.

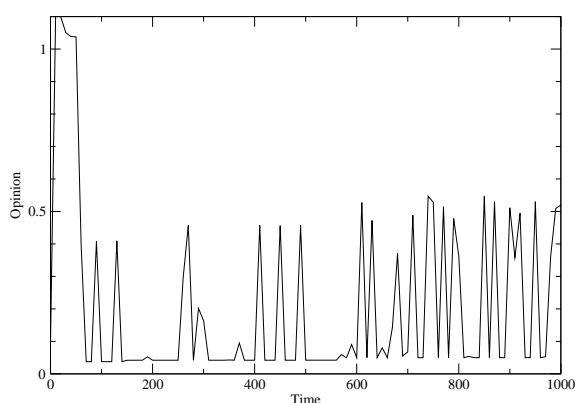


FIGURE 2.8 – Modèle n° 2 : graphe de  $I_+$  en fonction de  $t$

## 2.4 Influence des médias, pluralisme politique

Le pluralisme politique est sans doute l'une des principales caractéristiques des sociétés occidentales. Bien souvent, les médias ont des connexions intimes avec la classe politique, alors que les deux groupes sont en principe complètement indépendants, et on en mesure difficilement l'effet. Le nombre très limité de contributions sur ce sujet est d'ailleurs assez significatif de la difficulté du problème, voir [GPG05] par exemple. En faisant appel à la théorie cinétique, on peut imaginer deux types de stratégie. On peut d'abord utiliser plusieurs fonctions de distribution, chacune liée à un parti, permettant de mesurer la force de ce parti. C'est le point de vue adopté dans [LS05, LS06]. Avec Roberto Monaco et Francesco Salvarani, dans [B17], nous avons au contraire choisi de conserver une unique fonction de distribution et d'adopter une variable d'opinion multidimensionnelle.

### 2.4.1 Propriétés du modèle

Nous avons donc proposé un modèle cinétique pour décrire l'évolution de l'opinion dans une communauté fermée concernant un choix entre plusieurs options, comme des partis politiques. Nous avons pris en compte deux mécanismes de formation d'opinion : l'interaction binaire entre individus, encore semblable à celle de [B18], et l'influence des médias de masse.

Lorsque plusieurs choix sont possibles, l'un des problèmes consiste à obtenir un classement des options indépendant des individus. Aussi avons-nous introduit un vecteur d'opinion, dont la dimension coïncide avec le nombre de choix. S'il existe  $p \geq 1$  options,  $x_i \in [-1, 1]$  est la variable d'accord associée au choix  $\mathcal{P}_i$ ,  $1 \leq i \leq p$ , et le vecteur d'opinion  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p) \in [-1, 1]^p$  décrit, pour chaque individu, son sentiment par rapport à chaque option. La fonction de distribution  $f$  est maintenant définie sur  $\mathbb{R}_+ \times [-1, 1]^p$ .

#### Les interactions binaires

Si  $\mathbf{x}, \mathbf{x}^*$  sont les vecteurs d'opinion de deux individus avant interaction, les vecteurs d'opinions post-collisionnelles sont obtenus grâce à une généralisation de la règle de collision (2.1)–(2.2) :

$$\begin{cases} x'_i = \frac{x_i + x_i^*}{2} + \eta(x_i) \frac{x_i - x_i^*}{2} \\ (x_i^*)' = \frac{x_i + x_i^*}{2} + \eta(x_i^*) \frac{x_i^* - x_i}{2} \end{cases} \quad 1 \leq i \leq p. \quad (2.11)$$

Une fois (2.11) connue, les échanges d'opinions entre individus sont décrits à l'aide d'un noyau de collision de type Boltzmann, donné sous forme faible :

$$\langle Q(f, f), \varphi \rangle = \beta \iint_{[-1, 1]^{2p}} f(t, \mathbf{x}) f(t, \mathbf{x}^*) [\varphi(\mathbf{x}') - \varphi(\mathbf{x})] d\mathbf{x}^* d\mathbf{x}, \quad (2.12)$$

où  $\varphi$  est une fonction-test régulière de la variable  $\mathbf{x}$ , et  $\beta \in \mathbb{R}_+$  est la section efficace (qui peut aussi dépendre de  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{x}^*$ ).

#### Les médias

Les effets des médias sur la population sont pris en compte à l'aide d'un milieu extérieur, comparable à la quantité introduite dans [CDT09]. Cette hypothèse ajoute un terme linéaire à l'équation. Pour chaque média  $\mathcal{M}_j$ ,  $1 \leq j \leq m$ , on définit sa force  $\alpha_j$ , traduisant son influence sur la population, et son vecteur d'opinion  $\mathbf{X}^j \in [-1, 1]^p$ , par rapport à chaque option/parti politique.

L'effet de chaque média  $\mathcal{M}_j$  sur un individu est alors décrite, au niveau microscopique, par un mécanisme rappelant la règle de collision (2.11) :

$$\tilde{x}_i = x_i + \xi_j (|X_i^j - x_i|) (X_i^j - x_i),$$

pour tout  $i$  et  $j$ . Les fonctions  $\xi_j$  sont les fonctions microscopiques d'attraction vers le média. Au niveau mésoscopique, l'influence de chaque média s'effectue via un opérateur intégral linéaire, dépendant éventuellement du temps, noté  $\mathcal{L}_j$ ,  $1 \leq j \leq m$ . Il

possède la structure classique des noyaux de Boltzmann linéaires, et s'écrit sous forme faible, comme :

$$\langle \mathcal{L}_j f, \varphi \rangle = \alpha_j \int_{[-1,1]^p} f(t, \mathbf{x}) [\varphi(\tilde{\mathbf{x}}) - \varphi(\mathbf{x})] d\mathbf{x}, \quad (2.13)$$

où  $\varphi = \varphi(\mathbf{x})$  est une fonction-test adaptée.

### L'équation modèle

En combinant ces deux phénomènes,  $f$  est solution, au sens des distributions, de l'équation

$$\partial_t f = \sum_{j=1}^m \mathcal{L}_j f + Q(f, f). \quad (2.14)$$

Nous avons prouvé existence et unicité de la solution à (2.12)–(2.14) dans  $C^0([0, T]; L^1((-1, 1)^p))$  pour des données initiales dans  $L^1((-1, 1)^p)$ , par un argument de point fixe. Bien entendu, la masse totale est encore conservée.

### 2.4.2 Expériences numériques

Les quantités d'intérêt ne sont plus des intégrales du type  $I_+$ , comme dans les précédents modèles. La fraction de la population en faveur de l'option  $\mathcal{P}_i$  est cette fois définie (si  $\|f\|_{L^1} = 1$ ) par

$$I_i = \int_{[x_i \geq \max_{\ell \neq i} x_\ell]} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

#### L'influence d'un média unique dans une société à deux partis

Lorsque l'opinion du média est en accord avec une partie, même minime, de la population, son influence est loin d'être négligeable. Quand les individus d'opinions pré-collisionnelles proches de l'opinion du média interagissent avec le reste de la population, les opinions de ces derniers sont attirées vers l'opinion du média. Dans cette situation, la fonction de distribution peut converger vers une masse de Dirac centrée en l'opinion du média. C'est ce qui arrive par exemple dans la figure 2.9.

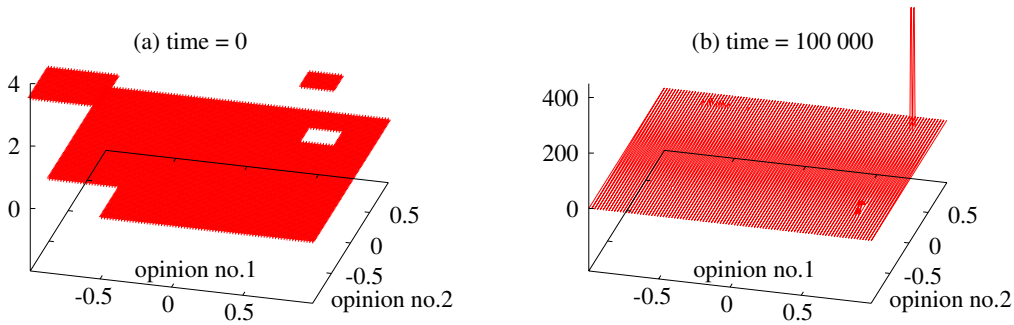


FIGURE 2.9 – Convergence en temps grand vers une masse de Dirac en l'opinion du média

Néanmoins, le modèle présente un effet de seuil : dans la figure 2.10, on voit que l'effet de concentration peut ne pas être global. La fonction de distribution ne tend pas vers 0 dans la région du plan  $[x_1 < -0,1; x_2 \simeq -0,75]$ .

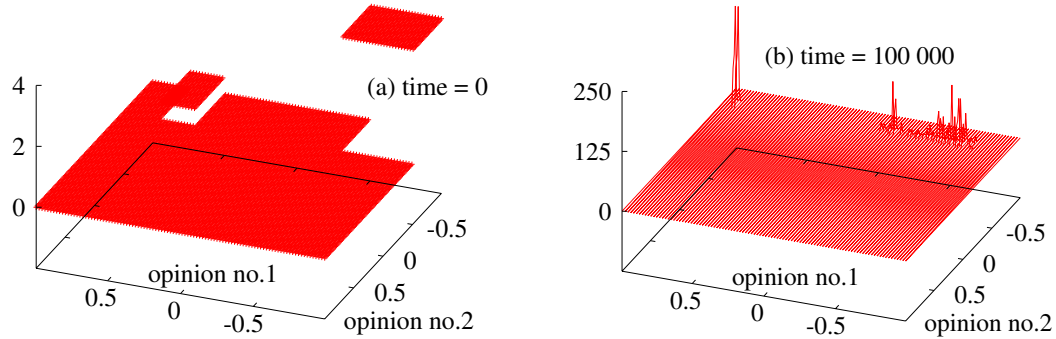


FIGURE 2.10 – Effet de seuil

### La manipulation de l'opinion par un média dans une société à deux partis

La population étant d'opinion uniformément distribuée à  $t = 0$ , on la soumet à deux médias initialement symétriques, dont l'opinion reste constante pour l'un, et dont on fait varier l'opinion de façon minime pendant un certain laps de temps pour l'autre. La force des médias reste en revanche identique. Une très faible variation de l'opinion du média a un effet drastique sur l'opinion moyenne de la population en faveur de chacun des deux partis, comme l'atteste la figure 2.11.

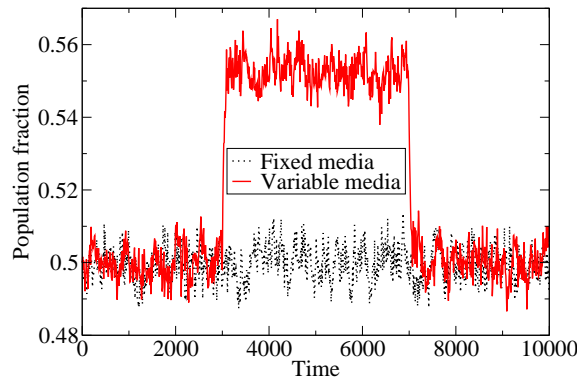


FIGURE 2.11 – Graphes de la fraction de la population favorisant un parti, à média constant/variable

### Un média extrémiste dans une société à trois partis

On considère maintenant une situation où le parti  $\mathcal{P}_1$  dispose du soutien d'un média d'opinion plus exacerbée, alors que les deux autres partis ont une opinion plus consensuelle. Ils sont tous trois de même force. Dans cette situation, on voit sur la figure 2.12 qu'un média extrémiste n'est pas d'un grand secours pour le parti qu'il sou-



tient : les médias modérés sont bien plus efficaces. En fait, on constate que le parti  $\mathcal{P}_1$  a les mêmes faveurs de la population que s'il n'avait aucun média en soutien.

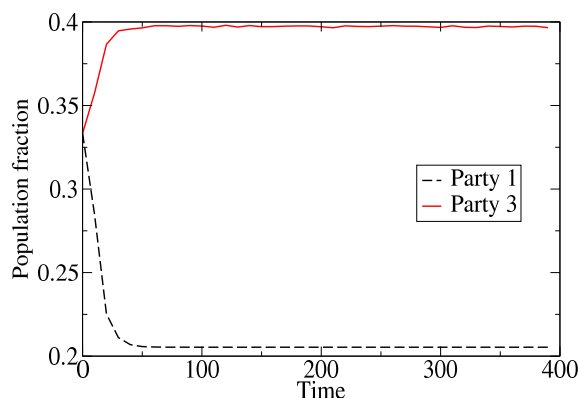


FIGURE 2.12 – Média extrémiste : graphes de  $I_1$  et  $I_3$  en fonction du temps

### Un média fort d'opinion variable dans une société à trois partis

Pour terminer, on a toujours trois partis, avec chacun un média en soutien. Le média  $\mathcal{M}_1$ , soutien du parti  $\mathcal{P}_1$ , a un vecteur d'opinion périodique, et sa force est supérieure à celle des deux autres médias. La représentativité du parti  $\mathcal{P}_1$  au sein de la population en est significativement augmentée, comme le montre la figure 2.13.

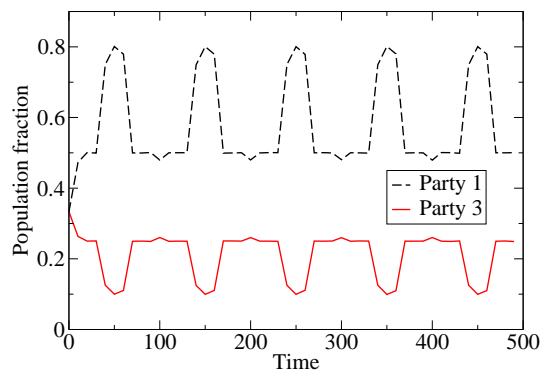


FIGURE 2.13 – Média fort d'opinion variable : graphes de  $I_1$  et  $I_3$  en fonction du temps

## Chapitre 3

# Modèles couplés fluide-cinétique

### Sommaire

<b>3.1 Fluides compressibles . . . . .</b>	<b>44</b>
3.1.1 Présentation du modèle . . . . .	44
3.1.2 Expériences numériques . . . . .	46
3.1.3 Fragmentation . . . . .	47
<b>3.2 Aérosols dans le poumon . . . . .</b>	<b>51</b>
3.2.1 Écoulement de l'air . . . . .	51
3.2.2 Modèle aérosol-air . . . . .	52
3.2.3 Discussion sur la rétroaction . . . . .	54
3.2.4 Comparaisons avec l'expérience . . . . .	55
3.2.5 Analyse mathématique . . . . .	57

Comme on l'a déjà expliqué en préambule, les modèles à plusieurs phases permettent de mieux représenter la réalité de certains fluides qui sont en fait des mélanges. Je me suis intéressé à des problèmes où une phase dispersée (des petites particules ou gouttelettes) évoluent au sein d'une phase continue porteuse. La phase dispersée est décrite à l'aide d'une équation cinétique, et peut subir diverses actions : dans les exemples que je présente ici, on verra de la convection, de la compressibilité, de la fragmentation, ainsi que l'action du fluide. La phase porteuse est pilotée par des équations de type Euler ou Navier-Stokes, auxquelles on peut adjoindre un terme d'échange avec la phase dispersée. J'ai choisi de séparer mes contributions en deux groupes, selon que le fluide porteur est compressible ou non. Cette distinction permet en fait de piloter en amont le champ d'applications de chacun des modèles.

Dans ces modèles gaz-particules, la phase dispersée, souvent appelée *spray*, est décrite par une fonction de distribution  $f$  qui peut dépendre de nombreuses variables, à commencer par  $t$ ,  $x$ , la vitesse  $v$  des particules, mais aussi leur rayon, la déformation, *etc.* Au contraire, la phase porteuse fait appel aux quantités macroscopiques naturelles, comme la densité ou la vitesse. Introduits par Williams [Wil85], vus également dans [CP83], les modèles de *sprays* sont particulièrement bien adaptés aux écoulements polydispersés, où la taille des particules peut varier significativement, voir par exemple les travaux des équipes de Massot et Villedieu, comme [MV01]. Le même cadre a été utilisé par O'Rourke [O'R81] et son équipe à Los Alamos pour développer les générations successives du code Kiva [AROD85, AOB89, Ams93, Ams97, TT06].

Dans les différents travaux présentés ci-dessous, en reprenant la classification du tableau 1 p. 5, les applications de 3.1 font appel à des *sprays* modérément épais, voire épais, alors que dans le cadre du poumon, en 3.2, les aérosols sont plutôt des *sprays* fins, voire très fins.

### 3.1 Fluides compressibles

Dans l'article [B10], version améliorée de [B9], avec Laurent Desvillettes et Renaud Motte, j'ai travaillé sur la possibilité de prendre en compte la compressibilité des gouttelettes dans un modèle couplé fluide-cinétique, tant du point de vue de la modélisation que de la simulation numérique. Cette question est apparue dans le contexte de recherches au sein de la Direction des applications militaires du CEA, à la suite des travaux de Motte [Mot00].

Le modèle que nous avons étudié nécessite un certain nombre d'hypothèses concernant la phase dispersée. Tout d'abord, les gouttelettes sont supposées rester sphériques, mais de rayon variable. Néanmoins, on n'autorise pas d'échange de masse entre une particule et le fluide, ni entre deux particules, ce qui assure que les variations de rayon sont uniquement dues à la compressibilité des gouttelettes.

#### 3.1.1 Présentation du modèle

Les fonctions inconnues pour le fluide sont la fraction volumique  $\alpha$ , la densité  $\rho_g$ , la vitesse de l'écoulement  $u_g$ , l'énergie interne  $e_g$ , la température  $T_g$  et la pression  $p$ , toutes dépendant du temps  $t$  et de la position  $x \in \mathbb{R}^3$ . Les particules sont décrites par la fonction de distribution  $f$  dépendant de  $t$ , de  $x$ , de la vitesse  $v$  et de l'énergie interne  $e_p$ . La masse  $m$  de chaque particule reste constante, puisque les échanges de masse ne sont pas considérés. On n'a pas besoin d'introduire une pression relative aux particules car on fait l'hypothèse classique [LL67, Dre83] d'équilibre isobare : l'équilibre mécanique local entre une particule et le milieu ambiant est atteint beaucoup plus rapidement que l'équilibre thermodynamique des températures. Cela implique que le rayon d'une gouttelette et la masse volumique du fluide composant cette gouttelette ne peuvent pas faire partie des variables de la fonction de distribution, mais sont eux-mêmes des fonctions de  $e_p$ , tout en dépendant aussi de  $t$  et de  $x$  par la pression  $p$ . Cette propriété constitue une différence significative avec d'autres modèles, comme [AROD85, Sai95], où l'on considère des transferts de masse et non la compressibilité des particules, et où le rayon  $r$  des particules est alors une variable de la fonction de distribution.

#### Les équations d'état

On écrit d'abord les équations d'état pour le fluide :

$$p(t, x) = P_1(\rho_g(t, x), e_g(t, x)), \quad (3.1)$$

$$T_g(t, x) = T_1(\rho_g(t, x), e_g(t, x)). \quad (3.2)$$

Puis on définit implicitement la masse volumique des particules grâce à l'équilibre isobare

$$p(t, x) = P_2(\rho_p(t, x, e_p), e_p). \quad (3.3)$$

Enfin, on obtient la température à l'intérieur de la gouttelette par

$$T_p(t, x, e_p) = T_2(\varrho_p(t, x, e_p), e_p). \quad (3.4)$$

On note au passage que les grandeurs thermodynamiques ne dépendent pas de la variable  $v$ . En revanche, par définition de la masse volumique, on a la relation donnant le volume de la particule :

$$\frac{m}{\varrho_p} = \frac{4}{3}\pi r^3. \quad (3.5)$$

### Les équations du modèle compressible

On s'appuie donc sur le modèle avec particules incompressibles de [Mot00], et on ajoute les termes spécifiques à la compressibilité :

$$\partial_t(\alpha \varrho_g) + \nabla_x \cdot (\alpha \varrho_g u_g) = 0, \quad (3.6)$$

$$\partial_t(\alpha \varrho_g u_g) + \nabla_x \cdot (\alpha \varrho_g u_g \otimes u_g) + \nabla_x p = - \iint_{v, e_p} m \Gamma f \, dv \, de_p, \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha \varrho_g e_g) + \nabla_x \cdot (\alpha \varrho_g e_g u_g) + p [\partial_t \alpha + \nabla_x \cdot (\alpha u_g)] \\ = \iint_{v, e_p} \left[ (m \Gamma + \frac{m}{\varrho_p} \nabla_x p) \cdot (u_g - v) - 4\pi r \lambda \text{Nu}(T_g - T_p) \right] f \, dv \, de_p, \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\alpha = 1 - \iint_{v, e_p} \frac{m}{\varrho_p} f \, dv \, de_p, \quad (3.9)$$

$$m \Gamma = -\frac{m}{\varrho_p} \nabla_x p - D_p(v - u_g) + \varrho_g C_a \frac{m}{\varrho_p^2} \frac{d\varrho_p}{dt} (v - u_g), \quad (3.10)$$

$$m \Phi = 4\pi r \lambda \text{Nu}(T_g - T_p) + \frac{pm}{\varrho_p^2} \frac{d\varrho_p}{dt}, \quad (3.11)$$

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (f \Gamma) + \partial_{e_p} (f \Phi) = 0, \quad (3.12)$$

où on a posé

$$\frac{d\varrho_p}{dt} = \partial_t \varrho_p + v \cdot \nabla_x \varrho_p + \Phi \partial_{e_p} \varrho_p.$$

Commentons les choix effectués dans (3.10)–(3.11), en particulier liés à la compressibilité des gouttelettes. Les quantités  $\Gamma$  et  $\Phi$  sont vues comme les variations de  $v$  et  $e_p$  dans l'espace des phases, et sont donc respectivement données par la relation fondamentale de la dynamique (3.10) et par transfert d'énergie (3.11) appliqué à une particule donnée.

Dans (3.10), les deux premiers termes apparaissent déjà lorsque les gouttelettes sont incompressibles : ils représentent les forces de pression et de traînée. Le dernier terme est spécifique au cas compressible, et permet de modéliser un effet de masse ajoutée. Le terme principal  $m/\varrho_p^2 \, d\varrho_p/dt$  prend en compte la variation du volume des gouttelettes due à leur compressibilité, les autres termes étant obtenus par analogie avec une force de masse ajoutée standard [RM52, CGW78]. On peut constater numériquement que cette contribution est en fait assez petite devant la traînée.

Dans (3.11), l'échange de chaleur  $4\pi r \lambda \text{Nu}(T_g - T_p)$  est déjà pris en compte dans le cas incompressible. Le terme contenant  $d\varrho_p/dt$  modélise le travail des forces mécaniques liées à la compressibilité.

Les divers coefficients physiques ( $Nu$ ,  $D_p$ ...) sont définis avec précision en annexe de [B10] et ont, pour la majorité, été choisis dans [RM52]. Ils dépendent la plupart du temps des fonctions inconnues et des variables du problème, telles que  $\alpha$ ,  $u_g$  ou  $v$ .

**Remarque 3.1.** *Le problème (3.1)–(3.12) est implicite, car on voit notamment des dérivées temporelles de  $\varrho_p$  de part et d'autre des équations. Comme on ne considère que des gouttelettes faiblement compressibles, la résolution numérique se fait explicitement en temps.*

Les propriétés physiques importantes sont vérifiées dans la

**Proposition 3.2.** *La masse, la quantité de mouvement et l'énergie du système couplé gaz-particules sont conservées.*

En faisant la preuve de la proposition précédente, on constate que le terme complémentaire lié à la compressibilité dans (3.11) est absolument essentiel pour assurer la conservation de l'énergie totale, alors que le terme de masse ajoutée dans (3.10) apparaît comme uniquement piloté par des considérations physiques.

### 3.1.2 Expériences numériques

Les tests présentés ici sont académiques et entrent parfaitement dans l'hypothèse des *sprays* épais. Malheureusement, dans des cas-tests plus réalistes, la fraction volumique du *spray* peut monter au-delà de 0,1, rendant le modèle en principe invalide. Cela ouvre un grand champ d'investigation tant pour la modélisation (choix et transition de modèles) que pour le numérique.

#### Des gouttelettes en déséquilibre thermique avec le fluide

Ce premier test constitue une forme de validation de l'implémentation du transfert d'énergie entre les deux phases, car toutes les vitesses sont nulles. Le gaz porteur et le fluide constituant les gouttelettes sont tous deux des gaz parfaits. Les particules sont uniformément réparties dans le gaz et restent immobiles au cours du temps. On peut dès lors chercher  $f$  sous la forme  $f(t, e_p) = \delta_{e_p=e(t)}$ , où la fonction  $e$  est l'énergie interne d'une quelconque des particules. Comme les équations d'état s'écrivent très simplement, toutes les autres quantités sont reliées à  $e_g$  et  $e$  par des relations algébriques, ce qui permet finalement de réduire notre problème à un simple système différentiel. Les deux phases convergent vers l'équilibre thermique, comme indiqué dans la figure 3.1, et la figure 3.2 montre que l'échange d'énergie entre elles implique des variations de la masse volumique des particules. De surcroît, on obtient un excellent accord entre la résolution par Maple du problème réduit semi-explicite et les résultats obtenus par le code CEA.

#### Un jet conique de particules

Le second test est dû à Dukowicz [Duk80] et permet de comparer les situations compressible et incompressible en deux dimensions axisymétriques. Le porteur suit une loi d'état de gaz raidis et les particules sont constituées d'étain. Les gouttelettes sont injectées à 100 m/s dans un fluide initialement immobile suivant les génératrices d'un cône de révolution d'angle  $\pi/4$ .

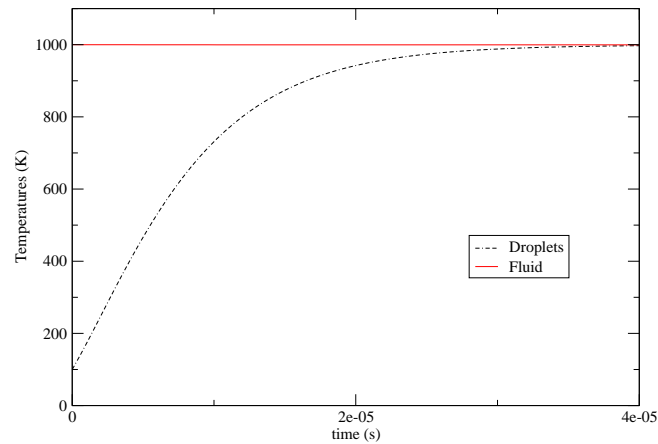


FIGURE 3.1 – Équilibrage des températures

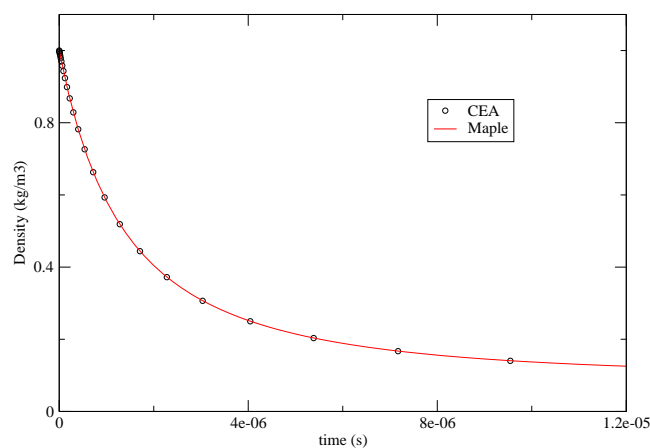


FIGURE 3.2 – Variations de la masse volumique des particules

La température du fluide est, au début de la simulation, supérieure à celle des particules. La figure 3.3 permet de constater que les particules refroidissent le fluide. On pourrait aussi constater qu'elles mettent le porteur en mouvement. La compressibilité faible est clairement mise en évidence dans la figure 3.4.

### 3.1.3 Fragmentation

Ce travail [B1] débuté au Cemracs 2003 et financé par la DGA (Direction générale de l'Armement, ex-Délégation générale pour l'Armement) était motivé par l'étude du comportement d'un liquide pendant et après l'impact d'un projectile sur un réservoir rempli de ce liquide. Il contient deux parties très distinctes : la première sur la modélisation d'un nuage de particules généré par l'impact à partir de nappes liquides

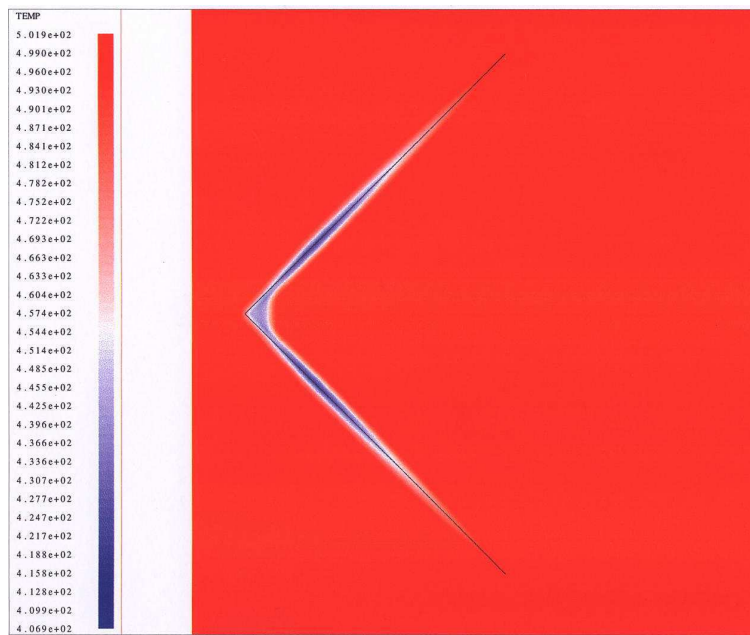


FIGURE 3.3 – Évolution de la température du fluide

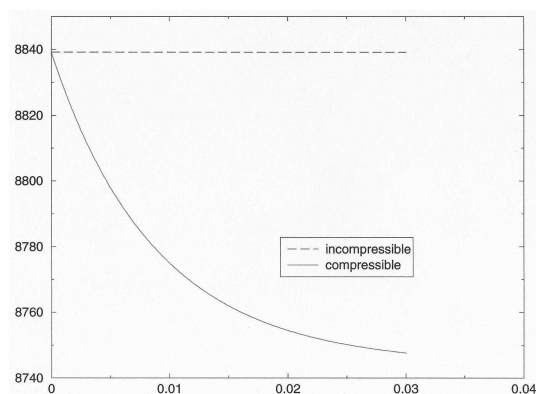


FIGURE 3.4 – Masse volumique d'une gouttelette échantillon

et évoluant dans l'air, pour prendre en compte les phénomènes de fragmentation des gouttelettes dus aux échelles de vitesses et aux ondes de pression dans l'air ; et la seconde sur le transport d'un corps rigide interagissant avec un liquide compressible au sein duquel il évolue. Je ne parlerai que de la première partie, à laquelle je me suis davantage consacré, bien que la seconde entre clairement dans la catégorie des modèles couplés.

Le phénomène-clé est ici la fragmentation des gouttelettes générées après l'impact. Les autres phénomènes du type coalescence ou collisions sont négligés, mais on peut en trouver une étude numérique dans [BD03], par exemple. Au lieu d'utiliser le modèle TAB [Bar04b], mieux adapté aux particules de petit nombre de Weber, nous avons choisi le modèle d'onde de Reitz [Rei87, Bau01], et l'avons intégré dans un modèle cinétique [Hyl99, Bar04b]. Ce petit modèle que je présente ci-dessous n'est pas couplé à un modèle fluide (le fluide est d'ailleurs donné dans les calculs). Néanmoins, j'ai choisi d'en parler ici, car il est voisin de la partie dynamique du modèle à gouttelettes

compressibles que j'évoque en 3.1.1. Ici, les particules sont supposées incompressibles, donc de masse volumique  $\varrho_p$  constante. On néglige toutes les forces subies par la phase dispersée, hormis la force de traînée. Ceci est justifié seulement au début des calculs, car, par la suite, la gravitation prend certainement le pas.

Le modèle cinétique est assez atypique, aussi ai-je choisi de le présenter un peu plus en détail.

### Pour prendre en compte la fragmentation

La fonction de distribution  $f$  dépend toujours de  $t$ ,  $x$  et  $v$ , mais aussi du rayon  $r$  des particules, et vérifie l'équation

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (f \gamma) + \partial_r (f \chi) = Q_{\text{frag}}(f).$$

L'accélération  $\gamma$  d'une gouttelette est encore donnée par la relation fondamentale de la dynamique

$$\gamma = -\frac{1}{m} D_p(v - u_g).$$

Il est important de noter la dépendance de chacune des quantités précédentes par rapport aux variables  $t$ ,  $x$ ,  $v$  et  $r$ .

Pour donner une forme explicite à  $\chi$  et  $Q_{\text{frag}}(f)$ , il faut expliquer le modèle microscopique de Reitz pour la fragmentation. Il fait appel à plusieurs nombres sans dimension, dont les nombres de Reynolds et de Weber [RM52]. D'ailleurs, on fait appel à deux nombres de Reynolds pour décrire les rapports locaux entre la friction et la viscosité : celui qui est associé au fluide au voisinage d'une particule, noté  $Re$ , et celui de la particule elle-même, noté  $Re_p$ , soit

$$Re = \frac{r \varrho_g |v - u_g|}{\mu_g}, \quad Re_p = \frac{r \varrho_p |v - u_g|}{\mu_p},$$

où  $\mu_g$  et  $\mu_p$  désignent respectivement la viscosité dynamique du fluide et des particules. De la même façon, on considère deux nombres de Weber pour décrire les rapports locaux entre l'inertie et les forces de tension superficielle de la gouttelette :

$$We = \frac{r \varrho_g |v - u_g|^2}{\sigma_p}, \quad We_p = \frac{r \varrho_p |v - u_g|^2}{\sigma_p},$$

où  $\sigma_p$  est la tension de surface de la goutte.

Une gouttelette qui se fragmente perd de la masse pour créer des petites particules filles, mais ne disparaît pas elle-même pour autant, comme c'est le cas dans la plupart des modèles de fragmentation. Seul le rayon de la particule mère change : il est calculé à l'aide de la fonction  $\chi$ . Les caractéristiques des gouttelettes filles sont déterminées grâce aux informations contenues dans  $Q_{\text{frag}}$ .

On s'intéresse à la perturbation de la surface de la gouttelette, en particulier sa longueur d'onde  $\lambda$  et le taux d'accroissement associé  $\omega$ . Ces deux valeurs sont données, dans le modèle de Reitz, par des relations algébriques empiriques impliquant les nombres sans dimension déjà évoqués. Cela permet d'obtenir un temps caractéristique de fragmentation  $\tau = C_\tau r / \omega \lambda$ , où  $C_\tau$  est aussi donné par le modèle de Reitz, dans [Bau01], dont le contexte physique est vraiment très voisin du nôtre.



Dès lors, la variation  $\chi$  du rayon des gouttelettes vérifie  $\chi = -v(r - R)$ , où  $R$  est proportionnel à la longueur d'onde (donc dépend de toutes les variables de l'espace de phase, notamment  $v$  et  $r$ ), et la fréquence de fragmentation  $\nu$  est donnée par

$$\begin{aligned} \nu &= 0 & \text{si } r \leq \lambda \text{ ou } We \leq \frac{1}{2}\sqrt{Re}, \\ \nu &= \frac{1}{\tau} & \text{sinon.} \end{aligned}$$

Enfin,  $Q_{\text{frag}}$  s'écrit, au sens des distributions, comme

$$Q_{\text{frag}}(f)(v, r) = \iint_{v_*, r_*} \int_{\mathcal{S}_1(v_*)} \nu(v_*, r_*) \frac{3r_*^2(r_* - R_*)}{R_*^3} \delta_{V_*}(v) \delta_{R_*}(r) f(v_*, r_*) \frac{ds}{2\pi} dr_* dv_*,$$

où  $R_* = R(t, x, v_*, r_*)$ ,  $V_* = v_* + v_\perp n$ , avec  $v_\perp = 0,5\lambda\omega$ , et  $n$  est un vecteur aléatoire du disque unité  $\mathcal{S}_1(v_*)$  du plan normal à  $v_*$ .

On peut vérifier les propriétés de conservation de la masse totale et de la quantité de mouvement totale des gouttelettes.

### Deux expériences numériques

La première simulation renvoie à une situation où le fluide donné est complètement immobile ( $u_g = 0$ ). Avec une distribution initiale en rayon des particules entre 0,5 et 1 mm, on voit sur la figure 3.5 que l'on converge vers une distribution essentiellement monodispersée en rayon, voisine de 0,2 mm.

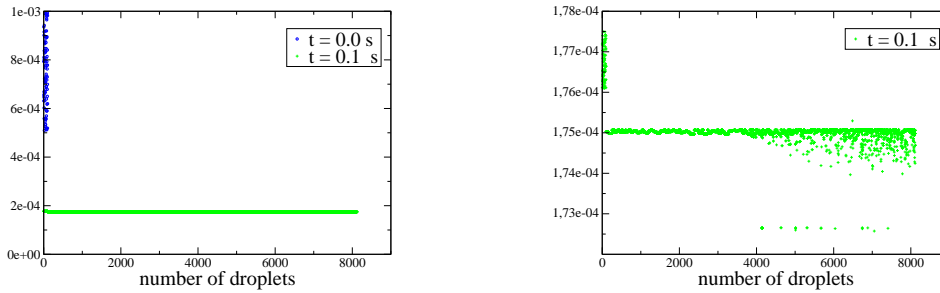


FIGURE 3.5 – Rayons des particules dans un fluide immobile (m)

Dans la seconde simulation, on fait passer un choc dans le fluide :  $|u_g|$  passe de 0 à  $400 \text{ m.s}^{-1}$  à un instant donné. La distribution initiale en rayon est de moyenne plus faible, entre 5 et  $10 \mu\text{m}$ , pour limiter le nombre de particules créées. À la fin du calcul, sur la figure 3.6, on voit que les rayons des gouttelettes sont compris entre 2,54 et  $2,62 \mu\text{m}$ . La dispersion relative à l'état final est plus grande que dans le premier cas. Il faut noter que même des tailles initiales supérieures de particules auraient mené à la même gamme de rayons à l'état final. Seul le nombre de particules générées aurait changé (significativement).

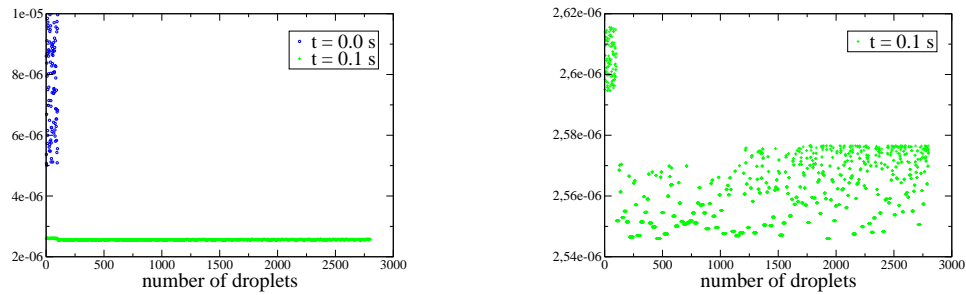


FIGURE 3.6 – Rayons des particules dans un fluide avec choc (m)

Le travail autour des questions de modèles gaz-particules au CEA-DAM s’est poursuivi au cours de ces dernières années, notamment dans les thèses de Céline Baranger [Bar04a, BD06] (*sprays* fins à modérément épais, avec collisions et fragmentations), Julien Mathiaud [Mat06, Mat10, DM10] (*sprays* modérément épais, limites hydrodynamiques) et Aude Champmartin [Cha11, CDM10] (collisions simplifiées par BGK).

## 3.2 Aérosols dans le poumon

Des aérosols thérapeutiques aux particules d’origines diverses flottant dans l’atmosphère, nous sommes souvent amenés à respirer et inhaler une large gamme d’entités de petite taille. Ces particules doivent alors interagir avec notre système respiratoire, et par exemple induire des effets mécaniques ou chimiques sur la respiration. La respiration est le processus permettant d’amener l’air (en fait, essentiellement, l’oxygène) aux alvéoles pulmonaires, lieux d’échange oxygène-gaz carbonique avec le sang. Si les particules sont nocives, elles doivent pouvoir être filtrées avant d’atteindre les zones alvéolaires. S’il s’agit de particules à but thérapeutique, elles doivent pouvoir atteindre les régions du poumon qu’elles doivent contribuer à soigner.

Le développement de modèles mathématiques et leur simulation numérique, éventuellement adaptée au patient, peut aider à la compréhension des phénomènes en jeu, et, par exemple, mener à l’amélioration de protocoles de soin par aérosol.

### 3.2.1 Écoulement de l’air

Le poumon a une structure d’arbre [Wei84], qu’on peut schématiquement diviser en trois régions, voir figure 3.7 :

- les voies respiratoires proximales, de la trachée à la septième génération : l’air peut y être considéré comme un fluide newtonien visqueux incompressible ;
- les petites bronches ou bronchioles, de la huitième à la seizième génération : l’écoulement est laminaire ;
- les voies respiratoires distales, constituées des acini ou sacs alvéolaires, de la dix-septième à la vingt-troisième génération : c’est le lieu des échanges gazeux, le régime y est majoritairement diffusif.

Dans la partie supérieure de l’arbre, les équations de Navier-Stokes constituent une bonne formulation pour décrire le mouvement de l’air [Mau04, BGM10, GMM05,

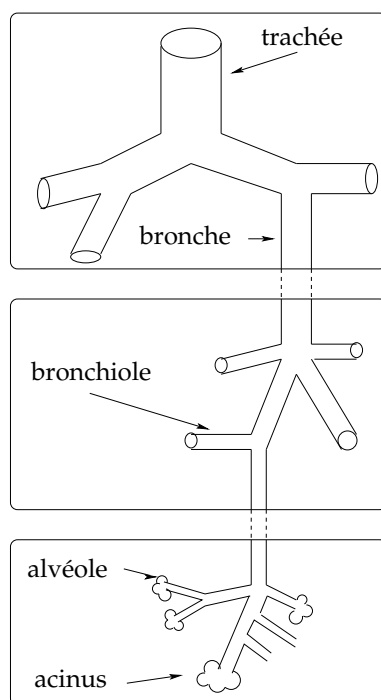


FIGURE 3.7 – Schéma du poumon humain

GMS08, SA07, Van09]. On pourrait aussi utiliser ces équations pour l'ensemble de l'arbre, mais cela s'avère impossible, non seulement pour des questions de coût de calcul, mais surtout à cause des limites de l'imagerie médicale, par laquelle on ne peut obtenir d'images du poumon au-delà de la dixième génération. Pour résoudre numériquement les équations de Navier-Stokes dans les voies respiratoires supérieures, on doit donc se munir de conditions aux limites en bas de l'arbre, par exemple, en utilisant le modèle de piston de [BGM10].

C'est sur la modélisation et la simulation numérique de l'aérosol dans les voies respiratoires supérieures que j'ai concentré mes travaux.

### 3.2.2 Modèle aérosol-air

Les aérosols thérapeutiques sont souvent utilisés comme traitement en injection pour des maladies fréquentes telles que la grippe, ou en inhalation pour des maladies spécifiquement respiratoires comme l'asthme et la bronchite chronique. Une gouttelette de l'aérosol est remplie de produits actifs devant intervenir dans les régions infectées, mais aussi d'autres fluides, dont le rôle est alors de protéger les produits actifs avant le dépôt.

Dans [B2], avec Céline Baranger, Pierre-Emmanuel Jabin et Simona Mancini, nous avons écrit un premier modèle cinétique pour les aérosols, inspiré de [CP83], et destiné à étudier les aérosols inhalés et injectés au niveau de la gorge, dans le contexte défini dans [Cor00]. Nous avons en particulier utilisé une équation de type Fokker-Planck pour prendre en compte la diffusion et évaluer la surface de dépôt dans le fond de la gorge. Nous avons constaté que l'injection augmente cette surface de dépôt en même temps que la quantité d'aérosol déposé, alors que l'inhalation permet de faire passer

davantage d'aérosol dans l'arbre bronchique.

Avec Lisl Weynans, dans [B21], nous avons étudié du point de vue physique et numérique l'effet de l'impaction de particules d'aérosol sur une paroi. Nous nous sommes appuyés sur les résultats de [KT07]. En principe, dans un écoulement de type eau-vapeur, les particules impactant une surface solide, que ce soit une paroi humide ou une couche mince fluide, se déposent, ou disparaissent par éclaboussure (*splashing*), engendrant alors des gouttelettes filles qui s'échappent de la paroi. La frontière entre les phénomènes de dépôt et d'éclaboussure a été très largement étudiée du point de vue physique. La description du phénomène s'appuie communément [MST95, CCM97, MST98, TR00] sur un paramètre dépendant simplement du nombre de Weber de la gouttelette impactant. Dans [KT07], c'est d'ailleurs le nombre de Weber lui-même qui pilote le comportement de la gouttelette. Dans la plupart des cas, on constate un dépôt direct, mais on peut aussi voir se former des éclaboussures. Néanmoins, les gouttelettes secondaires sont en fait formées du mucus sur la paroi et non d'extraits de la gouttelette mère. On est donc légitimement amené à considérer des conditions aux limites absorbantes pour la fonction de distribution.

Nous sommes maintenant en mesure d'écrire le système complet décrivant le mouvement de l'aérosol dans l'air pulmonaire.

La fonction de distribution  $f$  a pour seules variables  $t \geq 0$ ,  $x \in \mathbb{R}^d$  et  $v \in \mathbb{R}^d$ ,  $d = 2$  ou  $3$ . Comme on ne prend en compte aucun phénomène faisant changer une particule de rayon au cours du calcul, la distribution initiale en rayon est donc conservée. Ainsi  $r$  n'apparaît pas comme une variable dans les équations, mais simplement comme un paramètre.

Si l'on veut avoir une distribution polydispersée en rayon, il suffit de prendre initialement des particules de tailles différentes respectant la forme de la distribution souhaitée. Les diamètres initiaux des gouttelettes sont ensuite conservés au cours du temps, auquel cas  $f$  dépend aussi de  $r$ , mais, d'un point de vue numérique, chaque particule garde une taille constante au cours du calcul.

Comme l'air est un fluide incompressible, sa densité reste constante, notée  $\varrho_{\text{air}} = 1,11 \text{ kg.m}^{-3}$ . On note aussi  $\nu$  la viscosité cinématique de l'air et  $\mu = \varrho_{\text{air}} \nu$  la viscosité dynamique. On prend souvent  $\mu = 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ . Toutes ces valeurs, à la température de 310 K, sont issues de [APC84]. On suppose que l'aérosol est aussi un fluide incompressible, très semblable à l'eau, donc de masse volumique  $\varrho_p = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ . Gardons aussi à l'esprit que dans le cas de particules polluantes, la masse volumique peut être significativement bien plus grande. Cela a son importance pour la discussion sur la rétroaction.

Finalement  $f$ ,  $u_g$  et  $p$  vérifient le jeu d'équations suivant :

$$\partial_t u_g + \nabla_x \cdot (u_g \otimes u_g) - \nu \Delta_{xx} u_g + \frac{\nabla_x p}{\varrho_{\text{air}}} = \frac{\mathcal{F}_{\text{aero}}}{\varrho_{\text{air}}}, \quad (3.13)$$

$$\nabla_x \cdot u_g = 0, \quad (3.14)$$

$$\partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot (af) = 0, \quad (3.15)$$

où  $a$  est l'accélération de la particule, principalement due à la force de Stokes exercée sur l'aérosol par le fluide, et dont l'expression est donnée par

$$a(t, x, v, r) = \frac{6\pi\mu r}{m(r)} (u_g(t, x) - v), \quad (3.16)$$

et où  $\mathcal{F}_{\text{aero}}$  est la force exercée par l'aérosol sur l'air, c'est-à-dire

$$\mathcal{F}_{\text{aero}}(t, x) = - \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+} f(t, x, v, r) m(r) a(t, x, v, r) dv dr \quad (3.17)$$

### 3.2.3 Discussion sur la rétroaction

L'inhalation d'un aérosol peut induire des effets mécaniques au cours de la respiration. En effet, la présence de particules dans les voies respiratoires peut perturber l'écoulement de l'air. Dans [B11], travail en collaboration avec Céline Grandmont, Bérénice Grec et Driss Yakoubi, entamé au Cemracs 2008, nous étudions numériquement, en deux dimensions, l'influence du *spray* sur l'air. Alors que le fluide a un effet indiscutable sur l'aérosol via la force de traînée, on néglige souvent dans la littérature la rétroaction de l'aérosol sur l'air [Gro01, CKZ01], faisant de la phase dispersée un *spray* très fin. Néanmoins, cette action de l'aérosol sur l'air n'est pas systématiquement négligée [GCC02]. Le travail que nous avons mené dans [B11] vise à déterminer, dans des situations voisines de l'application au poumon, dans quelle mesure la rétroaction est négligeable. En d'autres termes, il s'agit de voir dans quelles gammes de vitesses/tailles/masses volumiques l'aérosol constitue un *spray* fin ou très fin.

L'action de l'aérosol apparaît comme le terme source  $\mathcal{F}_{\text{aero}}$  dans (3.13). On compare les résultats numériques lorsque  $\mathcal{F}_{\text{aero}} = 0$  ou est donné par (3.16)–(3.17). Puisque l'aérosol a d'abord un effet purement local, l'étude n'implique pas l'usage de domaines de calcul physiologiquement réalistes. Aussi les calculs sont effectués dans un simple cylindre. Néanmoins, on obtient des effets globaux de la rétroaction, en particulier concernant le dépôt de particules, ce qui peut être surprenant.

On ajoute au système (3.13)–(3.17) des conditions aux limites sur le cylindre. Sur un des disques de base, l'entrée, on impose une valeur de  $f$  correspondant à l'inhalation de l'aérosol, ainsi qu'un débit entrant d'air. Sur l'autre, on n'impose rien sur  $f$ , mais une condition de Neumann homogène sur le fluide (sortie libre). Enfin, sur le reste de la surface du cylindre, on impose une condition de Dirichlet homogène sur la vitesse de l'air,  $u_g = 0$ , et une condition d'absorption pour la fonction de distribution, comme expliqué dans [B21] :  $f(t, x, v, r) = 0$  si  $v \cdot n(x) < 0$ , où  $n(x)$  est la normale sortante en  $x$  à la surface du cylindre.

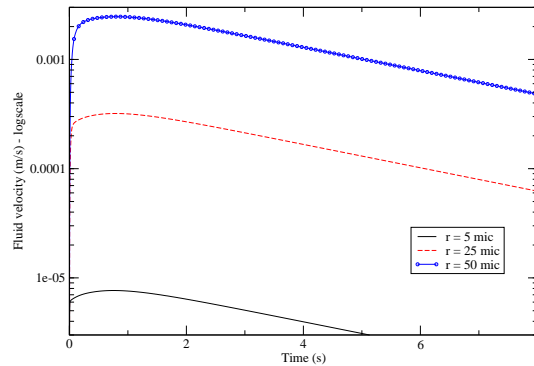


FIGURE 3.8 – Mise en mouvement d'un fluide initialement immobile par des particules de différents rayons

Les cas-tests sont détaillés dans [B11], mais les divers résultats montrent l'impor-

tance de la rétroaction dans un certain nombre de cas, lorsqu'on travaille avec un très grand nombre (correspondant à certains modèles de nébuliseurs) de particules physiques formant initialement un front, et injectées simultanément dans le domaine de calcul. Ainsi, dans la figure 3.8, de grosses particules d'eau parviennent à donner une vitesse assez significative à l'air.

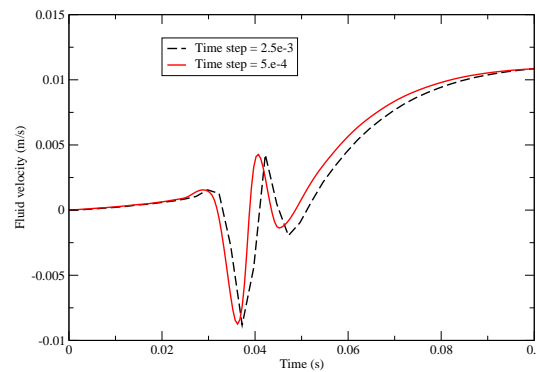


FIGURE 3.9 – Vitesse axiale de l'air près des particules

Au voisinage d'une particule, la vitesse du fluide mis en mouvement peut connaître des changements de signe rapides, comme le montrent les figures 3.9–3.10.

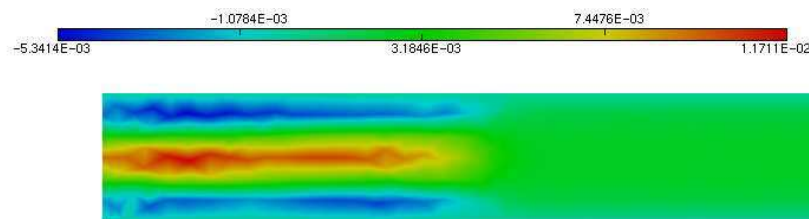


FIGURE 3.10 – Vitesse du fluide dans tout le domaine

Lorsque le fluide est en mouvement (profil de Poiseuille) et que les particules sont initialement immobiles, lorsqu'il n'y a pas de rétroaction, les particules sont transportées de l'entrée vers la sortie sans se déposer. C'est la rétroaction seule qui explique le phénomène de déposition que l'on peut constater numériquement : la présence de particules induit des vitesses transverses dans le fluide et pour l'aérosol, rendant alors possible ce phénomène de dépôt.

L'influence de la rétroaction sur le dépôt d'aérosol est l'un des sujets du stage post-doctoral d'Alexander Lorz. Cet article [B11] doit donc être vu comme la première étape dans l'étude de l'influence de la rétroaction dans le poumon.

### 3.2.4 Comparaisons avec l'expérience

Dans le poster présenté par Ayman Moussa sur les travaux en collaboration entre l'équipe-projet Reo de l'Inria Paris-Rocquencourt et l'équipe Aerodrug de Tours, au Congrès international sur les aérosols médicaux (ISAM'09), et qui fait l'objet d'un résumé publié dans la revue *Journal of Aerosol Medicine and Pulmonary Drug Delivery* [B22], l'objectif est de comparer les résultats expérimentaux obtenus dans [Dup07] avec ceux du code développé au sein de l'équipe-projet Reo, LifeV.

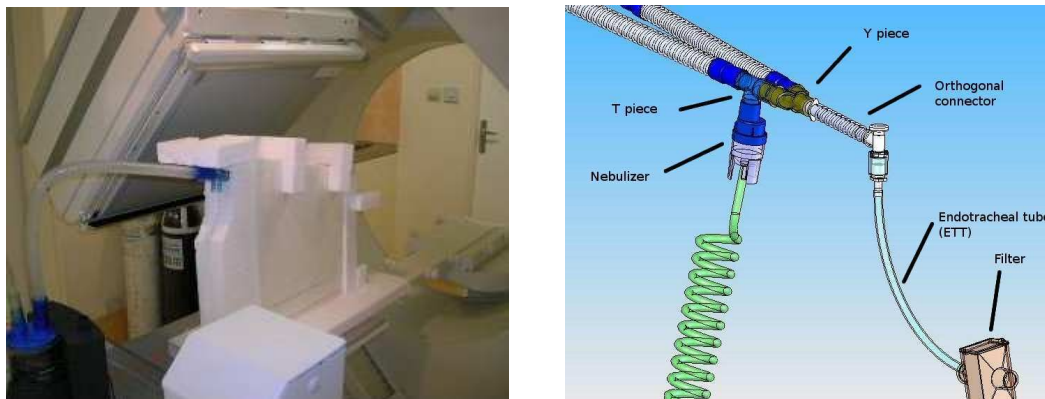


FIGURE 3.11 – Dispositif expérimental

Un nébuliseur est couplé à un ventilateur mécanique sur le dispositif expérimental illustré par la figure 3.11, et on procède à trois expériences, suivant trois débits d'air différents, comme expliqué dans la figure 3.12.

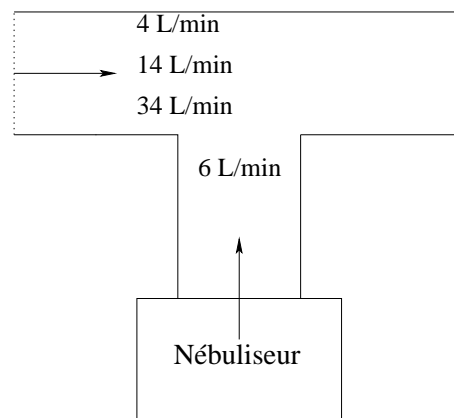


FIGURE 3.12 – Conditions de l'expérience

Nous avons alors lancé les calculs dans des conditions reproduisant le plus fidèlement possible les conditions de l'expérience, et dans le maillage à 600 000 tétraèdres, vu sur la figure 3.13.

Les résultats qualitatifs sur les zones de dépôt dans le dispositif sont assez convaincants, comme le montrent clairement les figures 3.14–3.15 : les dépôts ont lieu dans les mêmes régions, que ce soient expérimentalement ou numériquement. Les histogrammes de dépôt, qui ne sont pas montrés ici, sont eux aussi assez convaincants pour les deux débits les plus faibles. En revanche, on a un problème sur le débit le plus élevé : le phénomène de dépôt est majoré numériquement. On peut penser à deux explications, sur lesquelles nous travaillons actuellement. Il faut peut-être tenir compte de la rétroaction, au moins dans la pièce en « T ». Néanmoins, l'explication la plus probable réside sans doute dans le fait suivant : les calculs que nous avons menés concernent des particules ayant toutes le même diamètre (appelé diamètre aérodynamique médian en masse, soit MMAD en anglais), alors que les nébuliseurs génèrent plutôt des distributions lognormales en rayon.

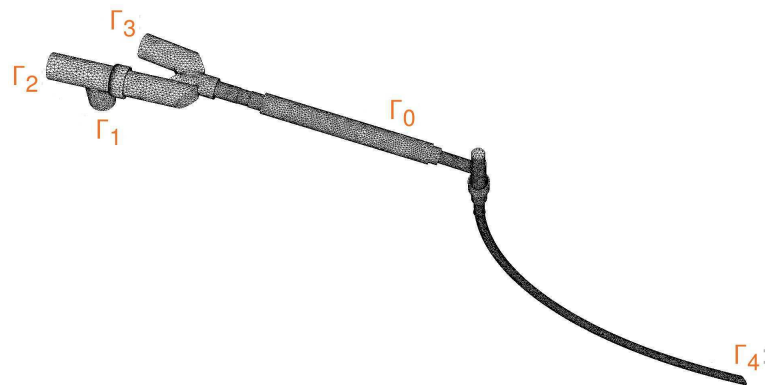


FIGURE 3.13 – Maillage du dispositif (réalisé par M. Grasseau)

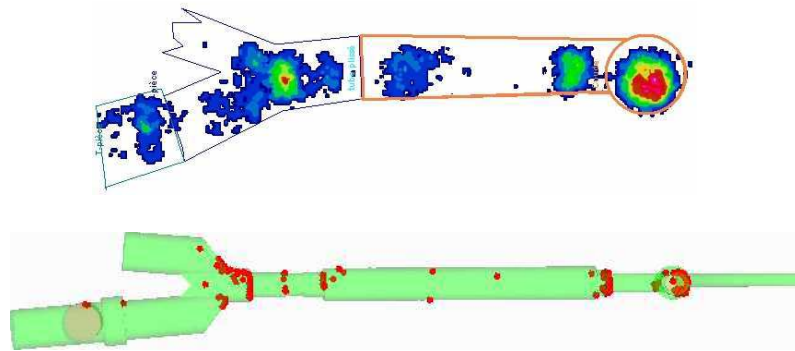


FIGURE 3.14 – Zones de dépôt (haut) expérimentales, (bas) numériques, vue de dessus

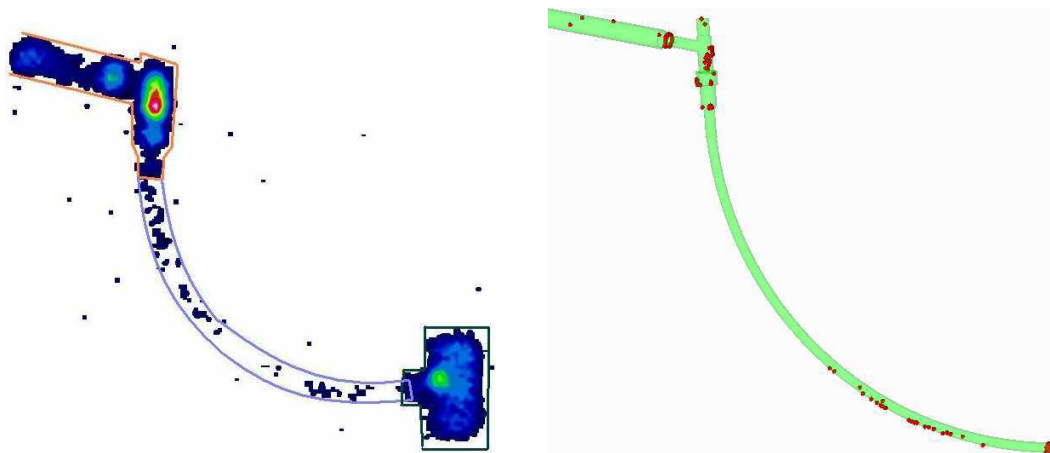


FIGURE 3.15 – Zones de dépôt (a) expérimentales, (b) numériques, vue latérale

### 3.2.5 Analyse mathématique

Dans [B8], avec Laurent Desvillettes, Céline Grandmont et Ayman Moussa, nous avons étudié l'existence de solutions globales en temps pour le système (3.13)–(3.17) dans un cadre périodique en espace, et en omettant la dépendance par rapport à  $r$ . La périodicité permet évidemment de ne pas avoir à gérer de conditions aux limites



de type entrant ou sortant. Pour simplifier, toutes les constantes de (3.13)–(3.17) sont maintenant prises égales à 1. On ajoute également un terme source  $F_{\text{ext}}$  dans (3.13).

### Le contexte

Un modèle voisin a été étudié par Hamdache [Ham98] : il y considère les équations de Stokes instationnaires couplées avec une équation de Vlasov, sur un domaine borné, avec des conditions aux limites de rebond sur la paroi, voir aussi [ABdMB97]. Il y a principalement trois différences entre notre travail et [Ham98].

- On considère les équations de Navier-Stokes en gardant le terme convectif.
- On obtient l'existence de solutions faibles dans les espaces d'énergie, mais pour des dimensions inférieures ou égales à 3, à cause d'inégalités de Sobolev.
- Notre démonstration est constructive et ne s'appuie pas sur un argument de type point fixe de Schauder : on construit une suite de solutions approchées qui converge vers la solution du problème couplé.

Goudon, Jabin et Vasseur [GJV04a, GJV04b] se sont aussi intéressés au même système couplé Vlasov-Navier-Stokes, mais du point de vue de la limite hydrodynamique, dans des régimes particuliers de la phase dispersée. Dans [MV07a], Mellet et Vasseur ont obtenu l'existence de solutions faibles globales pour le système Vlasov-Fokker-Planck-Navier-Stokes compressible, tenant ainsi compte d'effets diffusifs pour les particules et d'effets de compressibilité pour le fluide, avec conditions aux bords d'absorption ou de réflexion. Dans [MV07b], ils ont étudié quelques régimes asymptotiques de ce système. Pour le système Vlasov-Fokker-Planck-Navier-Stokes incompressible, Goudon *et al.* [GHMZ10] ont démontré l'existence et l'unicité de solutions globales régulières proches de l'équilibre, si la perturbation de l'équilibre possède un moment tendant vers 0 tout en préservant le moment d'ordre 0 (masse).

D'autres résultats d'existence concernent des fluides modélisés par l'équation de Burgers [DR99, Gou01] ou les équations d'Euler compressibles [BD06]. On peut aussi noter l'extension de l'article précédent à des *sprays* épais collisionnels dans [Mat10].

### Le résultat mathématique

On commence par remarquer que les solutions du système Vlasov-Navier-Stokes incompressible vérifient, au moins formellement, une égalité d'énergie :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_g\|_{L^2(\mathbb{T}^3)}^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \iint_{\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3} f |v|^2 dv dx \\ + \|\nabla_x u_g\|_{L^2(\mathbb{T}^3)}^2 + \iint_{\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3} f (u_g - v)^2 dv dx = \int_{\mathbb{T}^3} F_{\text{ext}} \cdot u_g dx. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Les deux premiers termes correspondent respectivement à l'énergie cinétique du fluide et du *spray*. Le système dissipe de l'énergie par viscosité du fluide, et par friction entre les deux phases. L'égalité (3.18) assure en tout cas que les solutions du système vérifient des estimations d'énergie, ce qui nous permet de définir le bon cadre fonctionnel pour les solutions. Soient  $H$  l'espace des fonctions périodiques de carré intégrable et à divergence nulle, et  $V$  son sous-espace contenu dans  $H^1$ . Nous avons obtenu le

**Théorème 3.3.** *Soit  $T > 0$ . On suppose que les données initiales et la force extérieure vérifient :*

$$f^{\text{in}} \in L^\infty(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3), \int_{\mathbb{R}^3} f^{\text{in}} |v|^2 dv \in L^\infty(\mathbb{T}^3), u_g^{\text{in}} \in L^2(\mathbb{T}^3), F_{\text{ext}} \in L^2(0, T; L^2(\mathbb{T}^3)).$$

*Alors le système Vlasov-Navier-Stokes incompressible admet au moins une solution faible  $(f, u_g)$  sur  $]0, T[$ , telle que  $f$  soit positive,*

$$f \in L^\infty(0, T; L^1 \cap L^\infty(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)), \quad f|v|^2 \in L^\infty(0, T; L^1(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)),$$

$$u_g \in L^\infty(0, T; H) \cap L^2(0, T; V) \cap C^0([0, T]; V'),$$

*avec l'inégalité d'énergie obtenue par (3.18) et le principe du maximum*

$$\|f\|_{L^\infty((0, T) \times \mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)} \leq e^{3T} \|f^{\text{in}}\|_{L^\infty(\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3)}.$$

La démonstration de ce résultat passe par la construction d'une suite de solutions approchées obtenues par régularisations de la vitesse convective et de la vitesse du fluide apparaissant dans la force de friction sur les particules, et par troncature des grandes valeurs de  $v$  dans le terme de rétroaction sur le fluide.

L'existence de solutions pour le système approché est obtenue en considérant un problème linéarisé approché où les équations de Navier-Stokes et l'équation de Vlasov sont découplées. La régularisation de  $u_g$  dans l'expression du terme de traînée permet de construire la solution de l'équation de Vlasov par la méthode des caractéristiques. On utilise la troncature des grandes valeurs de  $v$  pour contrôler le terme de rétroaction, et prouver que la suite des fonctions ainsi construites est de Cauchy. La régularisation de la vitesse convective permet d'obtenir des estimations *a priori* sur les termes faisant intervenir la convection.

Or la solution du système approché (non linéarisé) obtenue ci-dessus ne vérifie plus l'égalité d'énergie. On montre alors, pour des dimensions inférieures ou égales à 3, que, grâce à un contrôle suffisant des moments de  $f$  et à un lemme de Gronwall surlinéaire, la solution approchée vérifie une estimation en temps petit. Les termes convectifs sont facilement traités à l'aide des conditions aux limites périodiques. Pour l'inégalité d'énergie sur  $]0, T[$ , on constate que les résidus provenant des régularisations dans le bilan d'énergie tendent vers 0. On conclut par compacité (obtenue par contrôle de  $\partial_t u_g$ ) pour passer à la limite dans les termes non linéaires.

Avec Céline Grandmont et Ayman Moussa, nous travaillons actuellement sur l'analyse du même système couplé en domaine mobile (non périodique).



# Publications de l'auteur

- [B1] C. BARANGER, G. BAUDIN, L. BOUDIN, B. DESPRÉS, F. LAGOUTIÈRE, E. LAPÉBIE et T. TAKAHASHI : Liquid jet generation and break-up. In *Numerical methods for hyperbolic and kinetic problems*, vol. 7 de *IRMA Lect. Math. Theor. Phys.*, p. 149–176. Eur. Math. Soc., Zürich, 2005.
- [B2] C. BARANGER, L. BOUDIN, P-E. JABIN et S. MANCINI : A modeling of biospray for the upper airways. In *CEMRACS 2004 – Mathematics and applications to biology and medicine*, vol. 14 de *ESAIM Proc.*, p. 41–47 (électronique). EDP Sci., Les Ulis, 2005.
- [B3] A. BLOUZA, L. BOUDIN et S. M. KABER : Parallel in time algorithms with reduction methods for solving chemical kinetics. *Commun. Appl. Math. Comput. Sci.*, 5(2): 241–263, 2010.
- [B4] L. BOUDIN : A solution with bounded expansion rate to the model of viscous pressureless gases. *SIAM J. Math. Anal.*, 32(1):172–193 (électronique), 2000.
- [B5] L. BOUDIN : *Étude d'équations aux dérivées partielles cinétiques et hyperboliques de la physique*. Thèse de doctorat, université d'Orléans, 2000.
- [B6] L. BOUDIN, B. BOUTIN, B. FORNET, T. GOUDON, P. LAFITTE, F. LAGOUTIÈRE et B. MERLET : Fluid-particles flows : a thin spray model with energy exchanges. In *CEMRACS 2008 – Modelling and numerical simulation of complex fluids*, vol. 28 de *ESAIM Proc.*, p. 195–210. EDP Sci., Les Ulis, 2009.
- [B7] L. BOUDIN et L. DESVILLETES : On the singularities of the global small solutions of the full Boltzmann equation. *Monatsh. Math.*, 131(2):91–108, 2000.
- [B8] L. BOUDIN, L. DESVILLETES, C. GRANDMONT et A. MOUSSA : Global existence of solutions for the coupled Vlasov and Navier-Stokes equations. *Differential Integral Equations*, 22(11-12):1247–1271, 2009.
- [B9] L. BOUDIN, L. DESVILLETES et R. MOTTE : A particle-gas model for compressible droplets, 2000. Actes du Congrès *Trends in numerical and physical modeling for industrial multiphase flows*, Cargèse, France.
- [B10] L. BOUDIN, L. DESVILLETES et R. MOTTE : A modeling of compressible droplets in a fluid. *Commun. Math. Sci.*, 1(4):657–669, 2003.
- [B11] L. BOUDIN, C. GRANDMONT, B. GREC et D. YAKOUBI : Influence of the spray retraction on the airflow. In *CEMRACS 2009 – Mathematical Modelling in Medicine*, vol. 30 de *ESAIM Proc.*, p. 153–165. EDP Sci., Les Ulis, 2010.
- [B12] L. BOUDIN, B. GREC et F. SALVARANI : A mathematical and numerical analysis of the Maxwell-Stefan diffusion equations. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 2011. Accepté pour publication sous réserve de modifications.

- [B13] L. BOUDIN, B. GREC et F. SALVARANI : The Maxwell-Stefan diffusion limit for a kinetic model of mixtures. Prépublication HAL, 2011. Soumis.
- [B14] L. BOUDIN, D. GÖTZ et B. GREC : Diffusion models of multicomponent mixtures in the lung. In *CEMRACS 2009 – Mathematical Modelling in Medicine*, vol. 30 de *ESAIM Proc.*, p. 91–104. EDP Sci., Les Ulis, 2010.
- [B15] L. BOUDIN et J. MATHIAUD : A numerical scheme for the one-dimensional pressureless gases system. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 2011. À paraître.
- [B16] L. BOUDIN, A. MERCIER et F. SALVARANI : Conciliatory and contradictory dynamics in opinion formation. Prépublication HAL, 2011. Soumis.
- [B17] L. BOUDIN, R. MONACO et F. SALVARANI : Kinetic model for multidimensional opinion formation. *Phys. Rev. E*, 81(3):036109, 9, 2010.
- [B18] L. BOUDIN et F. SALVARANI : A kinetic approach to the study of opinion formation. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 43(3):507–522, 2009.
- [B19] L. BOUDIN et F. SALVARANI : The quasi-invariant limit for a kinetic model of sociological collective behavior. *Kinet. Relat. Models*, 2(3):433–449, 2009.
- [B20] L. BOUDIN et F. SALVARANI : Modelling opinion formation by means of kinetic equations. In *Mathematical modeling of collective behavior in socio-economic and life sciences*, Model. Simul. Sci. Eng. Technol., p. 245–270. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 2010.
- [B21] L. BOUDIN et L. WEYNANS : Spray impingement on a wall in the context of the upper airways. In *Mathematical and numerical modelling of the human lung*, vol. 23 de *ESAIM Proc.*, p. 1–9. EDP Sci., Les Ulis, 2008.
- [B22] A. MOUSSA, T. DUPARQUE, C. GRANDMONT, M. GRASSEAU, M. THIRIET, L. BOUDIN, P. DIOT et L. VECCELLIO : Aerosol deposition in a ventilator circuit : comparison between experimental results and numerical computations. *J. Aerosol Med. Pulm. D.*, 22(2):174, 2009. Résumé de poster pour l'ISAM 2009.

# Bibliographie

- [ABBD94] P. AYOUB, A. BAMBERGER et Z. BENJELLOUN-DABAGHI : Étude mathématique et numérique complète pour la réduction d'un schéma cinétique de production d'ozone. Rapport technique, Institut Français du Pétrole, 1994.
- [ABdMB97] O. ANOSHCHENKO et A. Boutet de MONVEL-BERTHIER : The existence of the global generalized solution of the system of equations describing suspension motion. *Math. Methods Appl. Sci.*, 20(6):495–519, 1997.
- [Ams93] A. A. AMSDEN : KIVA-3: a KIVA program with block-structured mesh for complex geometries. Rapport technique LA-12503-MS, Los Alamos National Laboratory, 1993.
- [Ams97] A. A. AMSDEN : KIVA-3V: a block-structured KIVA program for engines with vertical or canted valves. Rapport technique LA-13313-MS, Los Alamos National Laboratory, 1997.
- [AOB89] A. A. AMSDEN, P. J. O'ROURKE et T. D. BUTLER : KIVA-II: A computer program for chemically reactive flows with sprays. Rapport technique LA-11560-MS, Los Alamos National Laboratory, 1989.
- [APC84] J. E. AGNEW, D. PAVIA et S. W. CLARKE : Aerosol particle impaction in the conducting airways. *Phys. Med. Biol.*, 29:767–777, 1984.
- [AROD85] A. A. AMSDEN, J. D. RAMSHAW, P. J. O'ROURKE et J. K. DUKOWICZ : KIVA: A computer program for two- and three-dimensional fluid flows with chemical reactions and fuel spray. Rapport technique LA-10245-MS, Los Alamos National Laboratory, 1985.
- [Bal05] G. BAL : On the convergence and the stability of the parareal algorithm to solve partial differential equations. In *Domain decomposition methods in science and engineering*, volume 40 de *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, pages 425–432. Springer, Berlin, 2005.
- [BAO63] J.R. BOWEN, A. ACRIVOS et A. K. OPPENHEIM : Singular perturbation refinement to quasi-steady state approximation in chemical kinetics. *Chem. Eng. Sci.*, 18(3):177–188, 1963.
- [Bar04a] C. BARANGER : *Modélisation, étude mathématique et simulation des collisions*. Thèse de doctorat, École normale supérieure de Cachan, 2004.
- [Bar04b] C. BARANGER : Modelling of oscillations, breakup and collisions for droplets : the establishment of kernels for the T.A.B. model. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 14(5):775–794, 2004.
- [Bau01] S. D. BAUMAN : *A spray model for an adaptive mesh refinement code*. Thèse de doctorat, University of Wisconsin Madison, 2001.

- [BCH00] A. BLOUZA, F. COQUEL et F. HAMEL : Reduction of linear kinetic systems with multiple scales. *Combust. Theory Model.*, 4(3):339–362, 2000.
- [BD03] C. BARANGER et L. DESVILLETES : Study at the numerical level of the kernels of collision, coalescence and fragmentation for sprays, 2003. Actes du Congrès *Multiphase and Complex Flow Simulation for Industry*, Car-gèse, France.
- [BD06] C. BARANGER et L. DESVILLETES : Coupling Euler and Vlasov equations in the context of sprays : the local-in-time, classical solutions. *J. Hyperbolic Differ. Equ.*, 3(1):1–26, 2006.
- [BG98] Y. BRENIER et E. GRENIER : Sticky particles and scalar conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(6):2317–2328 (électronique), 1998.
- [BGL89] C. BARDOS, F. GOLSE et C. D. LEVERMORE : Sur les limites asymptotiques de la théorie cinétique conduisant à la dynamique des fluides incompressibles. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 309(11):727–732, 1989.
- [BGL91] C. BARDOS, F. GOLSE et C. D. LEVERMORE : Fluid dynamic limits of kinetic equations. I. Formal derivations. *J. Statist. Phys.*, 63(1-2):323–344, 1991.
- [BGL93] C. BARDOS, F. GOLSE et C. D. LEVERMORE : Fluid dynamic limits of kinetic equations. II. Convergence proofs for the Boltzmann equation. *Comm. Pure Appl. Math.*, 46(5):667–753, 1993.
- [BGM10] L. BAFFICO, C. GRANDMONT et B. MAURY : Multiscale modeling of the respiratory tract. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 20(1):59–93, 2010.
- [BJ98] F. BOUCHUT et F. JAMES : One-dimensional transport equations with discontinuous coefficients. *Nonlinear Anal.*, 32(7):891–933, 1998.
- [BJ99] F. BOUCHUT et F. JAMES : Duality solutions for pressureless gases, monotone scalar conservation laws, and uniqueness. *Comm. Partial Differential Equations*, 24(11-12):2173–2189, 1999.
- [BJL03] F. BOUCHUT, S. JIN et X. LI : Numerical approximations of pressureless and isothermal gas dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 41(1):135–158 (électronique), 2003.
- [BLMP09] M. BENDAHMANE, T. LEPOUTRE, A. MARROCCO et B. PERTHAME : Conservative cross diffusions and pattern formation through relaxation. *J. Math. Pures Appl. (9)*, 92(6):651–667, 2009.
- [BM02] G. BAL et Y. MADAY : A “parareal” time discretization for non-linear PDE’s with application to the pricing of an American put. In *Recent developments in domain decomposition methods (Zürich, 2001)*, volume 23 de *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, pages 189–202. Springer, Berlin, 2002.
- [BN05] E. BEN-NAIM : Opinion dynamics: rise and fall of political parties. *Europhys. Lett.*, 69:671–677, 2005.
- [BO88] Y. BRENIER et S. OSHER : The discrete one-sided Lipschitz condition for convex scalar conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 25(1):8–23, 1988.
- [Bou94] F. BOUCHUT : On zero pressure gas dynamics. In *Advances in kinetic theory and computing*, volume 22 de *Ser. Adv. Math. Appl. Sci.*, pages 171–190. World Sci. Publ., River Edge, NJ, 1994.

- [CC90] S. CHAPMAN et T. G. COWLING : *The mathematical theory of nonuniform gases*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, Cambridge, third édition, 1990. An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases, In co-operation with D. Burnett, With a foreword by Carlo Cercignani.
- [CCM97] G. E. COSSALI, A. COGHE et M. MARENGO : The impact of a single drop on a wetted solid surface. *Exp. Fluids*, 22:463–472, 1997.
- [CDM10] A. CHAMPMARTIN, L. DESVILLETES et J. MATHIAUD : A BGK-type model for inelastic Boltzmann equations with internal energy. *Riv. Math. Univ. Parma (N.S.)*, 1(2):271–305, 2010.
- [CDT09] V. COMINCIOLI, L. DELLA CROCE et G. TOSCANI : A Boltzmann-like equation for choice formation. *Kinet. Relat. Models*, 2(1):135–149, 2009.
- [Cer00] C. CERCIGNANI : *Rarefied gas dynamics*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 2000. From basic concepts to actual calculations.
- [CFL09] C. CASTELLANO, S. FORTUNATO et V. LORETO : Statistical physics of social dynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 81:591–646, 2009.
- [CGW78] R. CLIFT, J. R. GRACES et M. E. WEBER : *Bubbles, drops and particles*. Academic Press, 1978.
- [Cha80] H. K. CHANG : Multicomponent diffusion in the lung. *Fed. Proc.*, 39(10):2759–2764, 1980.
- [Cha11] A. CHAMPMARTIN : *Modélisation et étude numérique d'écoulements diphasiques : 1- Modélisation d'un écoulement homogène équilibré, 2- Modélisation des collisions entre gouttelettes à l'aide d'un modèle simplifié de type BGK*. Thèse de doctorat, École normale supérieure de Cachan, 2011.
- [CIP94] C. CERCIGNANI, R. ILLNER et M. PULVIRENTI : *The mathematical theory of dilute gases*, volume 106 de *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1994.
- [CJ04] L. CHEN et A. JÜNGEL : Analysis of a multidimensional parabolic population model with strong cross-diffusion. *SIAM J. Math. Anal.*, 36(1):301–322 (électronique), 2004.
- [CKR07] A. CHERTOCK, A. KURGANOV et Yu. G. RYKOV : A new sticky particle method for pressureless gas dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 45(6):2408–2441 (électronique), 2007.
- [CKZ01] J. K. COMER, C. KLEINSTREUER et Z. ZHANG : Flow structures and particle deposition patterns in double bifurcation airway models. Part 1. Air flow fields. Part 2. Aerosol transport and deposition. *J. Fluid Mech.*, 435:25–80, 2001.
- [CMP98] M. CAMPITI, G. METAFUNE et D. PALLARA : Degenerate self-adjoint evolution equations on the unit interval. *Semigroup Forum*, 57(1):1–36, 1998.
- [CMPP10] S. CORDIER, D. MALDARELLA, L. PARESCHI et C. PIATECKI : Microscopic and kinetic models in financial markets. In *Mathematical modeling of collective behavior in socio-economic and life sciences*, Model. Simul. Sci. Eng. Technol., pages 51–80. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 2010.



- [Cor00] T. E. CORCORAN : *Medical Nebulizers : Improved Device Design and a Study of Spray Dynamics in the Human Throat*. Thèse de doctorat, Carnegie Mellon University, 2000.
- [CP83] R. CAFLISCH et G. C. PAPANICOLAOU : Dynamic theory of suspensions with Brownian effects. *SIAM J. Appl. Math.*, 43(4):885–906, 1983.
- [CPT05] S. CORDIER, L. PARESCHI et G. TOSCANI : On a kinetic model for a simple market economy. *J. Stat. Phys.*, 120(1-2):253–277, 2005.
- [Cra75] J. CRANK : *The mathematics of diffusion*. Clarendon Press, Oxford, deuxième édition, 1975.
- [CW00] S.-K. CHUA et R. L. WHEEDEN : Sharp conditions for weighted 1-dimensional Poincaré inequalities. *Indiana Univ. Math. J.*, 49(1):143–175, 2000.
- [Des10] L. DESVILLETES : Some aspects of the modeling at different scales of multiphase flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 199(21-22):1265–1267, 2010.
- [DM10] L. DESVILLETES et J. MATHIAUD : Some aspects of the asymptotics leading from gas-particles equations towards multiphase flows equations. *J. Stat. Phys.*, 141(1):120–141, 2010.
- [DMPW09] B. DÜRING, P. MARKOWICH, J.-F. PIETSCHMANN et M.-T. WOLFRAM : Boltzmann and Fokker-Planck equations modelling opinion formation in the presence of strong leaders. *Proc. R. Soc. A*, 465(2112):2687–3708, 2009.
- [DMS05] L. DESVILLETES, R. MONACO et F. SALVARANI : A kinetic model allowing to obtain the energy law of polytropic gases in the presence of chemical reactions. *Eur. J. Mech. B Fluids*, 24(2):219–236, 2005.
- [DNAW00] G. DEFFUANT, D. NEAU, F. AMBLARD et G. WEISBUCH : Mixing beliefs among interacting agents. *Adv. Complex Systems*, 3:87–98, 2000.
- [DR99] K. DOMELEVO et J.-M. ROQUEJOFFRE : Existence and stability of travelling wave solutions in a kinetic model of two-phase flows. *Commun. Partial Differ. Equations*, 24(1-2):61–108, 1999.
- [Dre83] D. A. DREW : Mathematical modeling of two-phase flow. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 15:261–291, 1983.
- [DT62] J. B. DUNCAN et H. L. TOOR : An experimental study of three component gas diffusion. *AIChE Journal*, 8(1):38–41, 1962.
- [Duk80] J. K. DUKOWICZ : A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comp. Phys.*, 35:229–253, 1980.
- [Dup07] T DUPARQUE : *Étude par imagerie scintigraphique des dépôts d’aérosols dans un circuit de respirateur*. Mémoire de stage de Master 2, Université de Tours, 2007.
- [EG94] A. ERN et V. GIOVANGIGLI : *Multicomponent transport algorithms*, volume 24 de *Lecture Notes in Physics. New Series M : Monographs*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [EG97] A. ERN et V. GIOVANGIGLI : Projected iterative algorithms with application to multicomponent transport. *Linear Algebra Appl.*, 250:289–315, 1997.

- [EP85] L. A. ENGEL et M. PAIVA, éditeurs. *Gas mixing and distribution in the lung*, volume 25 de *Lung biology in health and disease*. Marcel Dekker, Inc., 1985.
- [ERS96] W. E. Yu. G. RYKOV et Ya. G. SINAI : Generalized variational principles, global weak solutions and behavior with random initial data for systems of conservation laws arising in adhesion particle dynamics. *Comm. Math. Phys.*, 177(2):349–380, 1996.
- [Eva10] L. C. EVANS : *Partial differential equations*, volume 19 de *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, deuxième édition, 2010.
- [FC03] C. FARHAT et M. CHANDESIS : Time-decomposed parallel time-integrators: theory and feasibility studies for fluid, structure, and fluid-structure applications. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 58(9):1397–1434, 2003.
- [Fic55a] A. FICK : On liquid diffusion. *Phil. Mag.*, 10(63):30–39, 1855.
- [Fic55b] A. FICK : Über Diffusion. *Poggendorff's Annalen der Physik und Chemie*, 94:59–86, 1855.
- [Gal97] S. GALAM : Rational group decision making: a random field Ising model at  $T = 0$ . *Phys. A*, 238(1-4):66–80, 1997.
- [Gal04] S. GALAM : Contrarian deterministic effects on opinion dynamics: “the hung elections scenario”. *Phys. A*, 333(1-4):453–460, 2004.
- [Gal07] S. GALAM : From 2000 Bush-Gore to 2006 Italian elections: voting at fifty-fifty and the contrarian effect. *Qual. Quant.*, 41(4):579–589, 2007.
- [Gal08] S. GALAM : Sociophysics : a review of Galam models. *Int. J. Mod. Phys. C*, 19(4):409–440, 2008.
- [GCC02] T. GEMCI, T. E. CORCORAN et N. CHIGIER : A numerical and experimental study of spray dynamics in a simple throat model. *Aerosol Sci. Technol.*, 36:18–38, 2002.
- [GGS82] S. GALAM, Y. GEFEN et Y. SHAPIR : Sociophysics: a new approach of sociological collective behaviour. I. Mean-behaviour description of a strike. *J. Math. Sociol.*, 9:1–23, 1982.
- [GH08] M. J. GANDER et E. HAIRER : Nonlinear convergence analysis for the parareal algorithm. In *Domain decomposition methods in science and engineering XVII*, volume 60 de *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, pages 45–56. Springer, Berlin, 2008.
- [GHMZ10] T. GOUDON, L. HE, A. MOUSSA et P. ZHANG : The Navier-Stokes-Vlasov-Fokker-Planck system near equilibrium. *SIAM J. Math. Anal.*, 42(5):2177–2202, 2010.
- [Gio91] V. GIOVANGIGLI : Convergent iterative methods for multicomponent diffusion. *Impact Comput. Sci. Engrg.*, 3(3):244–276, 1991.
- [Gio99] V. GIOVANGIGLI : *Multicomponent flow modeling*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1999.

- [GJ00] L. GOSSE et F. JAMES : Numerical approximations of one-dimensional linear conservation equations with discontinuous coefficients. *Math. Comp.*, 69(231):987–1015, 2000.
- [GJV04a] T. GOUDON, P-E. JABIN et A. VASSEUR : Hydrodynamic limit for the Vlasov-Navier-Stokes equations. I. Light particles regime. *Indiana Univ. Math. J.*, 53(6):1495–1515, 2004.
- [GJV04b] T. GOUDON, P-E. JABIN et A. VASSEUR : Hydrodynamic limit for the Vlasov-Navier-Stokes equations. II. Fine particles regime. *Indiana Univ. Math. J.*, 53(6):1517–1536, 2004.
- [GM91] S. GALAM et S. MOSCOVICI : Towards a theory of collective phenomena: consensus and attitude changes in groups. *Eur. J. Soc. Psychol.*, 21:49–74, 1991.
- [GMM05] C. GRANDMONT, Y. MADAY et B. MAURY : A multiscale/multimodel approach of the respiration tree. In *New trends in continuum mechanics*, volume 3 de *Theta Ser. Adv. Math.*, pages 147–157. Theta, Bucharest, 2005.
- [GMS08] C. GRANDMONT, B. MAURY et A. SOUALAH : Multiscale modelling of the respiratory track : a theoretical framework. In *Mathematical and numerical modelling of the human lung*, volume 23 de *ESAIM Proc.*, pages 10–29. EDP Sci., Les Ulis, 2008.
- [Gou01] T. GOUDON : Asymptotic problems for a kinetic model of two-phase flow. *Proc. R. Soc. Edinb., Sect. A, Math.*, 131(6):1371–1384, 2001.
- [GPG05] S. GEKLE, L. PELITI et S. GALAM : Opinion dynamics in a three-choice system. *Eur. Phys. J. B*, 45:569–575, 2005.
- [Gra58] H. GRAD : Principles of the kinetic theory of gases. In *Handbuch der Physik (herausgegeben von S. Flügge)*, Bd. 12, *Thermodynamik der Gase*, pages 205–294. Springer-Verlag, Berlin, 1958.
- [Gre95] E. GRENIER : Existence globale pour le système des gaz sans pression. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 321(2):171–174, 1995.
- [Gro01] J. B. GROTEBERG : Respiratory fluid mechanics and transport processes. *Annu. Rev. Biomed. Eng.*, 3:421–457, 2001.
- [GSR04] F. GOLSE et L. SAINT-RAYMOND : The Navier-Stokes limit of the Boltzmann equation for bounded collision kernels. *Invent. Math.*, 155(1):81–161, 2004.
- [GV07] M. J. GANDER et S. VANDEWALLE : Analysis of the parareal time-parallel time-integration method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 29(2):556–578 (électronique), 2007.
- [Ham98] K. HAMDACHE : Global existence and large time behaviour of solutions for the Vlasov-Stokes equations. *Japan J. Indust. Appl. Math.*, 15(1):51–74, 1998.
- [Hel93a] D. HELBING : Boltzmann-like and Boltzmann-Fokker-Planck equations as a foundation of behavioral models. *Phys. A*, 196(4):546–573, 1993.
- [Hel93b] D. HELBING : Stochastic and Boltzmann-like models for behavioral changes, and their relation to game theory. *Phys. A*, 193(2):241–258, 1993.

- [Hil02] D. HILBERT : Mathematical problems. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 8(10):437–479, 1902.
- [Hof83] D. HOFF : The sharp form of Oleĭnik’s entropy condition in several space variables. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 276(2):707–714, 1983.
- [Hyl99] J. J. HYLKEMA : *Modélisation cinétique et simulation numérique d’un brouillard dense de gouttelettes, application aux propulseurs à poudre*. Thèse de doctorat, université Toulouse-III, 1999.
- [KT07] D. KALANTARI et C. TROPEA : Spray impact onto flat and rigid walls : Empirical characterization and modelling. *Int. J. Multiphase Flow*, 33(5): 525–544, 2007.
- [KW97] R. KRISHNA et J. A. WESSELINGH : The Maxwell-Stefan approach to mass transfer. *Chem. Eng. Sci.*, 52(6):861–911, 1997.
- [LeV92] R. J. LEVEQUE : *Numerical methods for conservation laws*. Lectures in Mathematics ETH Zürich. Birkhäuser Verlag, Basel, deuxième édition, 1992.
- [LL67] L. D. LANDAU et E. M. LIFCHITZ : *Physique théorique tome 5 : physique statistique*. Mir, 1967.
- [LMT01] J.-L. LIONS, Y. MADAY et G. TURINICI : Résolution d’EDP par un schéma en temps « pararéel ». *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 332(7):661–668, 2001.
- [LN96] Y. LOU et W.-M. NI : Diffusion, self-diffusion and cross-diffusion. *J. Differential Equations*, 131(1):79–131, 1996.
- [LS05] M. LO SCHIAVO : Kinetic modelling and electoral competition. *Math. Comput. Modelling*, 42(13):1463–1486, 2005.
- [LS06] M. LO SCHIAVO : A dynamical model of electoral competition. *Math. Comput. Modelling*, 43(11-12):1288–1309, 2006.
- [Mad07] Y. MADAY : Parareal in time algorithm for kinetic systems based on model reduction. In *High-dimensional partial differential equations in science and engineering*, volume 41 de *CRM Proc. Lecture Notes*, pages 183–194. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2007.
- [Mat06] J. MATHIAUD : *Étude de systèmes de type gaz-particules*. Thèse de doctorat, École normale supérieure de Cachan, 2006.
- [Mat10] J. MATHIAUD : Local smooth solutions of a thin spray model with collisions. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 20(2):191–221, 2010.
- [Mau04] B. MAUROY : *Hydrodynamique dans le poumon, relations entre flux et géométries*. Thèse de doctorat, École normale supérieure de Cachan, 2004.
- [Max66] J. C. MAXWELL : On the dynamical theory of gases. *Phil. Trans. R. Soc.*, 157:49–88, 1866.
- [Mot00] R. MOTTE : A numerical method for solving particle-fluid equations, 2000. Actes du Congrès *Trends in numerical and physical modeling for industrial multiphase flows*, Cargèse, France.
- [Mou09] A. MOUSSA : *Étude mathématique et numérique du transport d’aérosols dans le poumon humain*. Thèse de doctorat, École normale supérieure de Cachan, 2009.

- [MST95] C. MUNDO, M. SOMMERFELD et C. TROPEA : Droplet-wall collisions : experimental studies of the deformation and breakup process. *Int. J. Multiphase Flow*, 21:151–173, 1995.
- [MST98] C. MUNDO, M. SOMMERFELD et C. TROPEA : On the modeling of liquid sprays impinging on surfaces. *Atomization and Sprays*, 8:625–652, 1998.
- [MST07] Y. MADAY, J. SALOMON et G. TURINICI : Monotonic parareal control for quantum systems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 45(6):2468–2482 (électronique), 2007.
- [MV01] M. MASSOT et P. VILLEDIEU : Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 332(9):869–874, 2001.
- [MV07a] A. MELLET et A. VASSEUR : Global weak solutions for a Vlasov-Fokker-Planck/Navier-Stokes system of equations. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 17(7):1039–1063, 2007.
- [MV07b] A. MELLET et A. VASSEUR : On the barotropic compressible Navier-Stokes equations. *Comm. Partial Differential Equations*, 32(1-3):431–452, 2007.
- [O’R81] P. J. O’ROURKE : *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. Thèse de doctorat, Los Alamos National Laboratory & Princeton University, 1981.
- [Pou02] F. POUPAUD : Diagonal defect measures, adhesion dynamics and Euler equation. *Methods Appl. Anal.*, 9(4):533–561, 2002.
- [PR97] F. POUPAUD et M. RASCLE : Measure solutions to the linear multi-dimensional transport equation with non-smooth coefficients. *Comm. Partial Differential Equations*, 22(1-2):337–358, 1997.
- [Rei87] R. D. REITZ : Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atom. Spray Tech.*, 3:309–337, 1987.
- [RM52] W. E. RANZ et W. R. MARSHALL : Evaporization from drops, parts I-II. *Chem. Eng. Prog.*, 48(3):141–180, 1952.
- [SA07] A. SOUALAH ALILA : *Modélisation mathématique et numérique du poumon humain*. Thèse de doctorat, Université Paris-Sud 11, 2007.
- [Sai95] L. SAINSAULIEU : *Contribution à la modélisation mathématique et numérique des écoulements diphasiques constitués d’un nuage de particules dans un écoulement de gaz*. Habilitation à diriger des recherches, université Paris-VI, 1995.
- [Seg11] N. SEGUIN : *Étude des équations différentielles hyperboliques en mécanique des fluides*. Habilitation à diriger des recherches, université Pierre et Marie Curie, 2011.
- [Sir62] L. SIROVICH : Kinetic modeling of gas mixtures. *Phys. Fluids*, 5:908–918, 1962.
- [Spo07] B. SPORTISSE : *Modélisation et simulation de la pollution atmosphérique*. Habilitation à diriger des recherches, université Pierre et Marie Curie, 2007.
- [SS89] L. A. SEGEL et M. SLEMROD : The quasi-steady-state assumption : a case study in perturbation. *SIAM Rev.*, 31(3):446–477, 1989.

- [Ste71] J. STEFAN : Über das gleichgewicht und die bewegung insbesondere die diffusion von gasmengen. *Akad. Wiss. Wien*, 63:63–124, 1871.
- [SWS00] K. SZNAJD-WERON et J. SZNAJD : Opinion evolution in closed community. *Int. J. Mod. Phys. C*, 11:1157–1166, 2000.
- [TDB<sup>+</sup>79] M. THIRIET, D. DOUGUET, J.-C. BONNET, C. CANONNE et C. HATZFELD : Influence du mélange He-O<sub>2</sub> sur la mixique dans les bronchopneumopathies obstructives chroniques. *Bull. Eur. Physiopathol. Respir.*, 15(5):1053–1068, 1979.
- [TK93] R. TAYLOR et R. KRISHNA : *Multicomponent mass transfer*. John Wiley & Sons, Inc., 1993.
- [Tos06] G. TOSCANI : Kinetic models of opinion formation. *Commun. Math. Sci.*, 4(3):481–496, 2006.
- [TR00] C. TROPEA et I. ROISMAN : Modeling of spray impact on solid surfaces. *Atomization and sprays*, 10:387–408, 2000.
- [TT06] D. J. TORRES et M. F. TRUJILLO : KIVA-4: An unstructured ALE code for compressible gas flow with sprays. *J. Comput. Phys.*, 219:943–975, December 2006.
- [Van09] C. VANNIER : *Modélisation mathématique du poumon humain*. Thèse de doctorat, Université Paris-Sud 11, 2009.
- [Vil02] C. VILLANI : A review of mathematical topics in collisional kinetic theory. *In Handbook of mathematical fluid dynamics, Vol. I*, pages 71–305. North-Holland, Amsterdam, 2002.
- [Wei71] W. WEIDLICH : The statistical description of polarization phenomena in society. *Br. J. Math. Stat. Psychol.*, 24:251–266, 1971.
- [Wei84] E. R. WEIBEL : *The pathway for oxygen : structure and function in the mammalian respiratory system*. Harvard University Press, 1984.
- [Wil50] C. R. WILKE : Diffusional properties of multicomponent gases. *Chem. Engng Prog.*, 46:95–104, 1950.
- [Wil85] F. A. WILLIAMS : *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, deuxième édition, 1985.
- [Zel70] Ya.B. ZEL'DOVICH : Gravitational instability – an approximate theory for large density perturbations. *Astron. and Astrophys.*, 5:84–89, 1970.